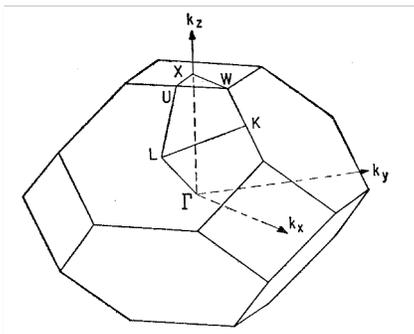




Universidad Autónoma del Estado de Morelos
Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y
Aplicadas

Centro de Investigación en Ciencias

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular. LIBRO DE RESUMENES.



23-24 / 06 / 2025

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

COMITÉ ORGANIZADOR



**Dr. Rolando Pérez
Álvarez**

rpa@uaem.mx



**Dr. Maykel Courel
Piedrahita**

maykelcourel@gmail.com



**Dr. José A. Otero
Hernández**

j.a.otero@itesm.mx



**Dr. Ernesto Manuel
Hernández Cooper**

emcooper@itesm.mx



**Dra. Maria De
Lourdes Albor
Aguilera**

mlalbor@ipn.mx



**Dr. Juan Manuel
Eugenio Ramirez
De Arellano Niño
Rincón**

jramirezdearellano@tec.mx



**Dr. Isaac Rodríguez
Vargas**

isaac@uaz.edu.mx



**Dr. Outmane
Oubram**

oubram@uaem.mx



Ing. Marco Huerta

hmarco@uaem.mx

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

INDICE

I. LUNES 23 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA CONFERENCIA PLENARIA

[I.1](#) **Oracio Navarro Chávez.** *Bandas planas en bicapas de cuasicristales.*

[I.2](#) **Zorayda Lazcano,** Jesús Arriaga. *Análogos acústicos en estructuras de silicio poroso: diseño y comprobación experimental.*

II. LUNES 23 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA CONFERENCIA

[II.1](#) **Giuseppe Pirruccio,** Yesenia Garcia, Martin Montagnac, César Ordóñez, Hugo Lara, Arturo Camacho. *Room-temperature polariton condensate in two-dimensional perovskite microcavities.*

[II.2](#) **Carlos Iván Cabrera Perdomo,** Rolando Pérez Álvarez. *Enfoque de puntos especiales para el cálculo del coeficiente de absorción óptica en auto ensamblados bidimensionales de puntos cuánticos de perovskita tipo-II.*

[II.3](#) **César L. Ordóñez-Romero,** Zorayda Lazcano-Ortiz, Giuseppe Pirruccio, Naser Qureshi, Oleg Kolokoltsev, Guillermo Monsivais. *Ondas de espín en cristales magnónicos.*

[II.4](#) **W. Luis Mochán** y Merlyn J. Juárez. *Generación de segundo armónico en metasuperficies.*

[II.5](#) Oscar Sotolongo Costa, **Miguel E. Mora-Ramos.** *The Non extensivity parameter as a seismic risk factor.*

[II.6](#) **Angela Camacho de la Rosa,** Rolando Pérez Álvarez. *Una fórmula para el tiempo de respuesta térmico.*

[II.7](#) **J. Escorcia-Garcia,** V.E. Ceniceros-Orozco, C.J. Saucedo-Flores, E. Carrillo-Villarreal, H.U. López-Herrera. *Desarrollo de vidrios y vitrocerámicos luminiscentes y su optimización mediante el uso de CaO y cristalización controlada.*

[II.8](#) **Arsenio Sánchez A.,** Jesús Madrigal M., J. Samuel Pérez Huerta², David Ariza F., I. Aydée Sustaita T. *Sintonización de plasmones en bi-capa de grafeno con potenciales químicos asimétricos para aplicaciones en biosensado SPR.*

[II.9](#) R. Hernandez, R. Velazquez, J. López, S. Amador, J.S. Pérez, J. Madrigal, I. Sustaita, J. Ortega, V. Castillo, M. Rangel, V. Agarwal, **D. Ariza.** *Sensor de bajo costo empleando resonancia de plasmón superficial.*

[II.10](#) **S. G. Castillo-López,** S. Cortés-López, D. N. Castillo-López. *Transferencia radiativa de calor en cristales plasmónicos de sub-longitud de onda.*

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

III. MARTES 24 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA CONFERENCIA PLENARIA

[III.1](#) **Thomas Werner Stegmann.** *Control del transporte electrónico en materiales cuánticos bidimensionales.*

[III.2](#) A. Astrain-Ortega, K. A. Rodríguez-Magdaleno, F. M. Nava-Maldonado, C. A. Duque, I. Rodríguez-Vargas, **J. C. Martínez-Orozco.** *Coefficiente de absorción intrabanda para puntos cuánticos multicapa GaAs/Al_xGa_{1-x}As oblatos, esféricos y prolato.*

IV. MARTES 23 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA CONFERENCIA

[IV.1](#) **Oswaldo de Melo Pereira.** *Recent Developments in Vapor Phase Techniques for the Growth of Molybdenum Oxides Compounds.*

[IV.2](#) **J.G. Rojas-Briseño,** P. Villasana-Mercado, S. Molina-Valdovinos, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas. *Aplicación de la aperiodicidad en dispositivos espín-valletrónicos basados en siliceno: Secuencia de Kolakoski.*

[IV.3](#) **R. Rodríguez-González,** R. D. Valdez-Cepeda, and I. Rodríguez-Vargas. *Transporte cuántico fractal en estructuras Cantor de grafeno: análisis del espectro de potencia.*

[IV.4](#) Camacho de la Rosa, **R. Esquivel Sirvent, D. Becerril.** *Termo-reflectancia de Materiales no-Fourier en el Dominio de la Frecuencia.*

[IV.5](#) **María Sánchez Colina.** *Surface photovoltage spectroscopy, a powerful technique for characterization of materials and devices.*

[IV.6](#) **Y. Y. Huamani Tapia,** I. Rodríguez-Vargas, J. G. Rojas-Briseño, S. Molina-Valdovinos. *Análisis del transporte cuántico y la polarización espín-valle en estructuras ferromagnéticas de borofeno 8-Pmmn.*

[IV.7](#) Thomas Stegmann, Armando Arciniega-Gutiérrez, Yonatan Betancur-Ocampo, **Jorge Lizarraga.** *Transporte electrónico y tunelaje anti-súper-Klein en un sistema de fósforo negro de pocas capas.*

[IV.8](#) **P. L. Valdés-Negrin,** W. Luis Mochán. *Acoplamiento fuerte entre excitones y fotones guiados en estructuras de WS₂-hBN.*

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

V. SESIÓN FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA (en línea)

V.1 Nouredine Lakouari, Rachid Marzoug, José Roberto Pérez Cruz. *“Bidirectional Traffic Flow with Lane-Changing and Autonomous Agents: A Cellular Automata-Based Study of Emissions and Phase Transitions.”*

V.2 J. A. Briones-Torres, R. Rodríguez-González, R. Pérez-Álvarez, S. Molina-Valdovinos, I. Rodríguez-Vargas. *“Eficiencia versus potencia en superredes aperiódicas tipo Fibonacci de bicapa de grafeno.”*

V.3 H. Zaari, K. Ouassoul, F. Mezzat, F. Elyahyaoui, A. El Kenz, A. Benyoussef. *“The investigation of optical and photocatalytic properties in $Dy_2 M_2 O_7$ ($M=Hf, Zr$ and Ce).”*

V.4 R. Marzoug, B. Castillo Téllez, G.A. Mejía Pérez, M. Castillo Téllez. *“Autómatas celulares para la optimización de emisiones de tráfico y la dinámica del flujo en sistemas de dos rutas mediante retroalimentación de información.”*

V.5 Angie Prada-Urrea, Claudia Echeverri-Cuartas, Natalia Agudelo-Pérez, **R. L. Restrepo**, A. L Morales, C. A Duque. *“Absorción óptica en puntos cuánticos de InP/ZnS biofuncionales.”*

VI. LUNES 23. SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS CONFERENCIA

VI.1 Stefaan Cottenier. *Personal reflections on the past and future of the dialogue between experiment and (ab initio) computation.*

VI.2 Mónica Araceli Canales Lizaola, A. Marcos, A. Zárate, L. F. Magaña. *Efectos de cubrir una superficie de titanio con una capa de carbono en la adsorción de monóxido de nitrógeno, dióxido de nitrógeno, ozono y formaldehído.*

VI.3 Nadxieli Delgado Jiménez. *Conductividad y propiedades ópticas en MXenos.*

VI.4 Alan Miralrio, Carlos Beltran, Andrés A. A. Abundis-Serrano. *Una comparación entre metodologías para la predicción de la inhibición de la corrosión en acero.*

VI.5 Juan Oseas López Fuentes, Roxana M. del Castillo, J. M. Ramírez de Arellano. *Estudio ab-initio de absorción de CO_2 en grafeno dopado con defectos, bajo la Teoría de la Funcional de la Densidad.*

VI.6 Jonathan Siu Loong Robles Hernández. *Modelos asistidos por inteligencia artificial para predecir la actividad de fármacos quimioterapéuticos modificados con el fullereno C_{60} y sus derivados.*

VI.7 Mariana Esther Torres Revuelta, Luis Fernando Magaña Solís. *Estudio de defectos estructurales en carburo de tungsteno bidimensional para la captura de N_2O .*

VII. MARTES 24. SESIÓN DE FÍSICA MATEMÁTICA CONFERENCIA

VII.1 Reinaldo Rodríguez-Ramos, Y. Espinosa-Almeyda, P. Rodríguez-Bermúdez, J. A. Otero. *From soft tissue to composite design: A multiscale perspective on visco-piezoelectric behavior.*

VII.2 Yoanh Espinosa-Almeyda, R. Rodríguez-Ramos, J. A. Otero, H. Camacho-Montes. *Propiedades efectivas de compósitos bifásicos micropolares reforzados con fibras cilíndricas.*

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VII.3 Panters Rodríguez-Bermúdez, R. Rodríguez-Ramos, E. Torres-Figueiras, Y. Espinosa-Almeyda, J.A. Otero, J. Merodio, J. A. R. Durán, Raimondo Penta. *Método de homogeneización asintótica aplicada a medios porosos laminados.*

VII.4 José A. Otero, Ernesto Hernández Cooper, Reinaldo Rodríguez-Ramos. *Propiedades efectivas termodinámicas. ¿Existe una conductividad térmica efectiva para el caso transiente?*

VII.5 O.L. Cruz-González, V. Deplanoa, B. Ghattas. *Deep Learning for Hemodynamics in Aortic Aneurysms.*

VII.6 Fernando Olivar Romero. *Fractional formulation for some relevant equations of mathematical physics.*

VII.7 José Luis Gómez Muñoz. *Introducción a “Physics-Informed. Neural Networks PINN”*

VII.8 Jorge Antonio Becerril Gómez. *Extremos con multiplicadores únicos en problemas de control óptimo.*

VII.9 Ernesto Hernández Cooper, José A. Otero. *Correcciones a la línea de saturación líquido-sólido en equilibrio termodinámico para aplicaciones en almacenamiento de energía térmica.*

VII.10 Rubén D. Santiago Acosta, José A. Otero, Rolando Pérez-Álvarez, Ernesto Hernández Cooper. *Densidades de energía en materiales de cambio de fase encapsulados a alta temperatura.*

VII.11 Mario Iván Estrada. *Supersimetría y operadores de escalera de primer y segundo orden en sistemas con masa dependiente de la posición.*

VII.12 Zurika Iveth Blanco Garcia. *Generación de socios supersimétricos con potenciales complejos y espectro real.*

VII.13 Miguel Angel Arvizu Coyotzi. *Efecto abanico y amplificación de un haz de luz en un medio fotorrefractivo*

VIII LUNES 23. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES CONFERENCIA

VIII.1 Oscar Andrés Jaramillo-Quintero. *Recubrimientos autolimpiantes de óxidos metálicos para aplicaciones en celdas solares.*

VIII.2 Fernando Ayala Mató. *Simulación de celdas solares: una herramienta de apoyo a la experimentación.*

VIII.3 M.V. Morales Gallardo, E. Regalado Pérez, X. Mathew, N.R Mathews. *Environmentally Friendly Development of Ag–Sb Chalcogenide Materials for Photodetection.*

VIII.4 Itzayana Segundo Suarez, M.V Morales Gallardo, A. Cerdán-Pasarán, X. Mathew, N.R Mathews. *Chemical synthesis and characterization of bismuth chalcogenide-based thin films for optoelectronic applications.*

VIII.5 Cesar Hernández Vasquez, Guillermo Leonardo Vidal Martínez, José Manuel Flores Marquez, Miguel Ángel González Trujillo, María de Lourdes Albor Aguilera. *Estudio óptico y estructural de películas delgadas de CdSe tratadas térmicamente con CdCl₂, MgCl₂ y mufla para su posterior aplicación en celdas solares.*

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VIII.6 JM Flores-Márquez, A.R. Andrade-Plata, C. Hernández-Vásquez, M.A. González Trujillo, M.L. Albor-Aguilera. *Depósito por Baño Químico Termostático de CdS dopado con Ag: Estudio comparativo de propiedades ópticas y estructurales.*

VIII.7 C. Rosas-Gómez, J.Y. Blancas-Martínez, M.A. Acosta-Mijangos, O. Gutiérrez-Barbosa, G. Poblete-Martínez, C.E. Santolalla-Vargas, J. Martínez-Limón. *Revalorización del bagazo de malta cervecera para la producción de bioetanol.*

VIII.8 René Rodríguez Rivera, Ignacio Carvajal Mariscal, Hilario Terres Peña. *Análisis térmico de un calentador solar de aire con diferente geometría de la placa absorbadora utilizando CFD.*

VIII.9 Jesús Edel EstradaVega, María de Lourdes Albor Aguilera, Daniel Ramírez Rosales, Cesar Hernández Vasquez, José Manuel Flores Marquez, Jesús Adán Fierro López. *Optimización de capas HTL de PEDOT:PSS sobre CdTe mediante spin-coating y su impacto en la eficiencia de conversión fotovoltaica en celdas solares.*

VIII.10 Jessica Katherine Lamus Sanguino, Carlos Eduardo Santolalla Vargas, Fernando Trejo Zárraga. *Evaluación Catalítica en la Hidrodesoxigenación de Fenol con Catalizadores NiMo Soportados en Sílices Mesoporosas.*

IX MARTES 24. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES CONFERENCIA

IX.1 Ignacio Carvajal Mariscal . *Las bombas de calor como tecnología para aprovechar las energías solar térmica y geotérmica.*

IX.2 D. Ramírez-Rosales, J. Vazquez-Samperio, S.N. Arellano-Ahumada, G. Ramos, I. González. *Celda electroquímica de prueba para la caracterización EPR in situ e in operando de electrodos de inserción del ion de litio en baterías.*

IX.3 F.J. Sánchez Rodríguez, J.G. Ojeda Inzunza, A. Barraza Valencia, Levi Inzunza, Maykel Courel. *Estudio de diferentes mecanismos de recombinación de la celda solar SnSe usando SnTe como una capa transportadora de huecos.*

IX.4 Reyna Méndez-Camacho, Esteban Cruz-Hernández, Máximo López-López. *Integración monolítica de GaAs sobre Si mediante autoensamble de nanofacetas: plataforma para tecnologías solares emergentes.*

IX.5 María de Lourdes Albor Aguilera. *Generación de CO₂ a partir del desperdicio de alimentos: Estrategias para mitigar su impacto ambiental.*

IX.6 Maykel Courel. *Simulación de celdas solares de película delgada y nanoestructurada bajo condiciones ideales y reales.*

IX.7 Guillermo Leonardo Vidal Martínez, María de Lourdes Albor Aguilera, Miguel Ángel González Trujillo, César Hernández Vasquez. *Propiedades optoelectrónicas de películas delgadas y nanoestructuradas de CdSe para su aplicación en celdas solares fotovoltaicas.*

IX.8 E. Roblero-Castañon, I. Montoya De Los Santos, Karina G Rodríguez-Osorio, Maykel Courel. *Estudio numérico en celdas solares de SnSSe bajo condiciones ideales con la incorporación de pozos cuánticos.*

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

[IX.9](#) **Alejandro Emmanuel Medina-Bautista, María de Lourdes Albor-Aguilera, Maykel Courel.** *Mejoramiento de celdas solares fotovoltaicas tipo CdTe, usando Spiro-OMeTAD como capa HTL.*

[IX.10](#) **Jesús A. Jiménez-Santana, E. Roblero-Castañón, Maykel Courel.** *Estudio de celdas solares de $Cu_2ZnGe(S,Se)_4$ con la incorporación de pozos cuánticos.*

[IX.11](#) **Farhan Yousaf, María de Lourdes Albor Aguilera, Maykel Courel Piedrahita.** *Estudios de simulación de SCAPS-1D sobre los factores limitantes de la eficiencia de celdas solares de Sb_2Se_3 .*

X SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA CARTELES

[X.1](#) **G. Laffit N. Estrada and Rolando Pérez Alvarez.** *Sobre Potenciales Termodinámicos De La Magnetoelastoelectricidad.*

[X.2](#) **David Quesada Saliba.** *From Moiré Nanostructures to Moiré Neurobiology: Ultraweak Photon Emissions, Coherent States, and a New Physics of the Brain.*

[X.3](#) **Eddy Rabanales Marquez, Humberto Noverola Gamas, Luis Manuel Gaggero Sager, Outmane Oubram.** *Influencia del desorden estructural en los coeficientes de rectificación óptica no lineal, generación del segundo y tercer armónico en un sistema delta-dopado doble en GaAs tipo n.*

[X.4](#) **Javier Ruidiaz, Zulia I. Camaano, and D. Quesada-Saliba.** *Estimating the mean grain size of nanostructured alloys synthesized by mechanical alloying by using gene expression programming.*

[X.5](#) **Mohammed Miniya, Yamlet Rodríguez-Lazcano, David Quesada Saliba,**

Outmane Oubram, Sarah Ruth Messina Fernández. *Impact of Temperature on Conductance and Thermoelectric Performance in Self-Similar Graphene-Based Structures.*

[X.6](#) **J. Andrés Rojas-Sánchez.** *Acoplamiento luz materia en espejos de Bragg.*

[X.7](#) **Alexis Angeles Robles, Roy Lopez Sesenes, Outmane Oubram.** *Implementación Con Técnicas De Ia Para Predecir Captación De Agua Y Otros Parámetros De Un Prototipo Con Celdas Peltier.*

[X.8](#) **Jeferson Daniel Rosero Benavides, José Roberto Pérez Cruz, Nouredine Lakouari.**

Fuzzy Logic-Driven Cellular Automaton for Pedestrian-Vehicle Interaction at Crosswalks.

[X.9](#) **L.A. Díaz-Valerio, R. Rodríguez-González, S. Molina-Valdovinos and I. Rodríguez-Vargas.** *Propiedades de transporte de valles-espines y magnetorresistencia en estructuras aperiódicas basadas en WSe_2 .*

[X.10](#) **M. Pablo Hernández, Dr. Outmane Oubram, Pedro Moreno.** *Estimación de la producción en invernaderos bajo condiciones climáticas y de suelo mediante inteligencia artificial e internet de las cosas.*

[X.11](#) **Antonio Mayorquin Galicia, Shunashi Guadalupe Castillo López.** *Estudio de Propiedades Ópticas de Cristales Fotónicos Temporales: Caracterización Modal, Propagación de Ondas y Amplificación de Señales.*

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

X.12 Marco Antonio Ramirez Rubio, Yair Alejandro Gutiérrez Álvarez, Roy López Sesenes, Outmane Oubram, Hugo Albeiro Saldarriaga Noreña. *Diseño De Prototipo Para El Conteo De Agua Captada.*

X.13 Rodrigo Sanchez Martinez, Yesenia Angelica Garcia Jomaso, David Ley Dominguez, Cesar L. Ordonez Romero¹, Hugo A. Lara Garcia, Arturo Camacho Guardian, Giuseppe Pirruccio. *Demostración experimental de un mecanismo para generar polaritones pesados robustos en cavidades fuertemente acopladas.*

X.14 B. D. Gutierrez-Reyna, Z. Zarhri, O. Oubram, L. M. Gaggero-Sager. *Influencia del diseño estructural en las propiedades de transporte y rendimiento termoeléctrico de superredes con compuerta de germaneno: estudio de configuraciones periódicas y aperiódicas.*

X.15 Marco A. Tun-Carrillo, Miguel E. Mora-Ramos, Hernán A. Gómez-Urrea, Ignacio Pérez-Quintana. *Efecto de índice casi-cero en cristal bidimensional usando barras de radios diferenciadas.*

X.16 Francisco Javier Martinez Fabian, Zakaryaa Zarhri. *Estudio DFT de la perovskita BaSnO₃ para aplicaciones opto – eléctricas y celdas solares.*

X.17 Marla N. Hernández-Delgado, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas. *Uso de estructuras de siliceno para mejorar las propiedades termoeléctricas.*

X.18 Ernesto Huipe Domratcheva, Uriel Alberto Díaz Reynoso, Oracio Navarro. *Estructura electrónica por defectos lineales en cuasicristales.*

X.19 Galván y García, Santiago, Stegmann, Thomas, Betancur Ocampo, Yonatan, Sánchez Ochoa, Francisco. *Caminos de Corriente Atómicamente Finos en Grafeno Kekulé-O.*

X.20 Josué Gutiérrez Rodríguez, Eduardo Rangel, Dora Iliana Medina and Alan Miralrio. *Adsorption of diatomic atmospheric compounds on defective MoS₂ monolayers.*

X.21 G. A. Navarro-López, R. Rodríguez-González, R. D. Valdez-Cepeda y I. Rodríguez-Vargas. *Transporte auto-similar y factores de escala en estructuras fractales tipo Cantor basadas en la bicapa de grafeno.*

X.22 Rodrigo Sanchez Martinez, Yesenia Angelica Garcia Jomaso, David Ley Dominguez, Cesar L. Ordonez Romero, Hugo A. Lara Garcia, Arturo Camacho Guardian, Giuseppe Pirruccio. *Demostración experimental de un mecanismo para generar polaritones pesados robustos en cavidades fuertemente acopladas.*

X.23 Omar Vicente Toledo Ruíz, Tania E. Soto, Michel Rivero. *Síntesis y caracterización de la perovskita simple SrFeO₃ dopada con Ga.*

I.1 Bandas planas en bicapas de cuasicristales

Oracio Navarro Chávez

Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Ex Hacienda de San José de la Huerta, C.P. 58190, Morelia, Michoacán
navarro@unam.mx

La formación de patrones de moiré y con ello las bandas planas de sistemas rotados, juegan un papel central para explicar la superconductividad en bicapas rotadas de grafeno. En este trabajo, se estudia a detalle el problema de bicapas de cuasicristales de Penrose y se encuentra que existen bandas planas cuando se aplica no solo una operación de rotación, si no, que también para una operación de translación. Tales bandas surgen para diferentes translaciones o ángulos de rotación de las capas de Penrose acopladas, donde los patrones de moiré aparecen en forma de gusanos de Conway. Estos patrones están formados por gusanos invertidos formando un patrón de interferencia a lo largo de la simetría rotacional de orden cinco. Los patrones de moiré se forman para ángulos de rotación especiales como $\pi/5$, $2\pi/5$, $3\pi/5$, $4\pi/5$ y π , se analizan en detalle dado que estos claramente son el origen de las bandas planas y los estados cuasicristalinos al nivel de Fermi. Un factor relevante que podemos observar es la formación de fasones que da lugar a los gusanos de Conway.

I.2 Análogos acústicos en estructuras de silicio poroso: diseño y comprobación experimental

Zorayda Lazcano¹, Jesús Arriaga¹, Diosdado Villegas Villegas²

¹*Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, México*

²*Departamento de Física, Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas, Santa Clara, Cuba*
Correo electrónico: zlazcano@ifuap.buap.mx

Las estructuras fonónicas constituyen una plataforma versátil para estudiar, en el régimen clásico, análogos de fenómenos asociados a la física cuántica y de materia condensada. En este trabajo se presentan avances en el diseño teórico y la validación experimental de análogos acústicos utilizando estructuras a base de silicio poroso. Estas estructuras, fabricadas mediante técnicas de anodización controlada, permiten ajustar parámetros morfológicos y mecánicos clave para la propagación de ondas acústicas en configuraciones periódicas o moduladas. A través de simulaciones y modelos analíticos, se predicen los espectros de transmisión y la distribución espacial de modos acústicos, los cuales se confirman mediante caracterización espectral en el rango ultrasónico. Los resultados muestran que es posible reproducir, mediante ondas mecánicas, dinámicas asociadas a sistemas complejos, lo que abre nuevas posibilidades para la exploración de conceptos fundamentales y el desarrollo de dispositivos acústicos con funcionalidad diseñada. La combinación de modelado físico y control estructural del silicio poroso se consolida así como una herramienta poderosa para la simulación de fenómenos de interés en física contemporánea.

- [1] Lazcano, Z., & Arriaga, J. (2014). Acoustic Wannier-Stark ladders and Bloch oscillations in porous silicon structures. *Applied Physics Letters*, 105(23), 233502.
- Lazcano, Z., Arriaga, J., & Aliev, G. N. (2014). Experimental and theoretical demonstration of acoustic Bloch oscillations in porous silicon structures. *Journal of Applied Physics*, 115(15), 154505.
- [2] Lazcano, Z., Meza, O., & Arriaga, J. (2014). Localization of acoustic modes in periodic porous silicon structures. *Nanoscale Research Letters*, 9, 628.
- [3] Lazcano, Z., García-Flores, Y., Díaz-de-Anda, A., Meza, O., Monsivais, G., & Arriaga, J. (2018). Acoustic doorway states in layered porous silicon structures. *Superlattices and Microstructures*, 121, 16–22.
- [4] Villegas, D., Lazcano, Z., Meza, O., & Arriaga, J. (2021). Acoustic analogy of Rabi rotations in coupled microcavities based on porous silicon. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 127, 114499.

II.1 Room-temperature polariton condensate in two-dimensional perovskite microcavities

Giuseppe Pirruccio, Yesenia Garcia, Martin Montagnac, César Ordóñez, Hugo Lara, Arturo Camacho

*¹Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,
Mexico D.F. 01000, Mexico*

E-mail: pirruccio@fisica.unam.mx

A halide perovskite micro-crystal can behave as a two-dimensional optical cavity whereby light is generated via exciton recombination and confined by means of whispering gallery modes. Under pulsed excitation, the perovskite micro-crystal acts as a micro-resonator emitting laser light. In this talk, we present the spatial and temporal coherence properties of this novel light source along with its spectral characterization and spatial distribution of the polarization state of the emitted light[1].

Agradecimientos

We thank Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología for its support through projects 1564464 and 1098652, UNAM PAPIIT IN104522, IN104325 and PIIF 2024.

[1] Yesenia Garcia, Martin Montagnac, César Ordóñez, Hugo Lara, Arturo Camacho, Giuseppe Pirruccio (in preparation).

II.2 Enfoque de puntos especiales para el cálculo del coeficiente de absorción óptica en auto ensamblados bidimensionales de puntos cuánticos de perovskita tipo-II

Carlos Iván Cabrera Perdomo¹, Rolando Pérez Álvarez²

¹*Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, 98160 Zacatecas, Mexico*

²*Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209 Cuernavaca, Morelos, Mexico*
Correo electrónico: carlos.cabrera@uaz.edu.mx, rpa@uaem.mx

Los puntos cuánticos de perovskita totalmente inorgánicos con forma cúbica habitual, se han convertido en una alternativa exitosa y económica a los nanomateriales electrónicamente funcionales, impulsando diversos campos de aplicación como la energía fotovoltaica de alta eficiencia. En este trabajo, presentamos un enfoque eficiente y casi analítico para el cálculo del coeficiente de absorción óptica en películas de puntos cuánticos de perovskita auto-ensambladas con alineación de bandas de tipo-II. Este enfoque aprovecha la técnica de puntos especiales para la integración sobre la zona bidimensional de Brillouin, lo que minimiza el coste computacional. El conjunto de puntos especiales de vector de onda, se genera mediante el método de Monkhorst y Pack [1]. El espectro de absorción óptica para películas de puntos cuánticos de fenil-C₆₀-butírico (PCBM)/CsPbI₃ se calcula de acuerdo con el experimento, suponiendo un ancho de línea homogéneo de 50 meV y considerando un conjunto de diez puntos especiales. Demostramos que la absorción de luz en estos sistemas es una propiedad optoelectrónica cooperativa resultante del acoplamiento mecánico-cuántico entre nanocubos de perovskita, lo que da lugar a estados de sistema extendidos. La generalidad de este enfoque lo hace adecuado para calcular el coeficiente de absorción óptica en una amplia clase de sistemas de puntos cuánticos de perovskita.

[1] Monkhorst H J and Pack J D, Special points for Brillouin-zone integration, *Phys. Rev. B*, **13** 5188–92 1976

II.3 Ondas de espín en cristales magnónicos

**César L. Ordóñez-Romero¹, Zorayda Lazcano-Ortiz², Giuseppe Pirruccio¹,
Naser Qureshi³, Oleg Kolokoltsev³, Guillermo Monsivais¹**

¹Instituto de Física, UNAM

²Instituto de Física, BUAP.

³Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, UNAM

E-mail: cloro@fisica.unam.mx

La ruptura controlada de la simetría traslacional en cristales magnónicos, mediante la incorporación de defectos diseñados, permite modificar de manera significativa sus propiedades dinámicas, abriendo nuevas vías para conectar fenómenos fundamentales con aplicaciones en el rango de frecuencias de microondas. Aunque diversos estudios han reportado la dependencia de las características frecuencia-amplitud con los parámetros estructurales del cristal, el comportamiento local de las ondas de espín en torno a los defectos ha sido poco explorado. En este trabajo, presentamos un análisis detallado de la propagación de ondas de espín superficiales (MSSW) en un MC con simetría rota, enfocándonos en la interacción de las ondas con los defectos, la evolución de los gaps de frecuencia a lo largo de la estructura y la distribución espacial de la energía en función de la frecuencia. Utilizando un sistema de exploración magneto-inductivo con resolución espacio-temporal, mapeamos la dinámica de propagación y la localización de modos en presencia de defectos. Nuestros resultados evidencian que, para frecuencias específicas, las ondas de espín son atrapadas por los defectos, dando lugar a modos localizados con confinamiento espacial de la energía.

Agradecimientos

UNAM-DGAPA 1G101424

II.4 Generación de segundo armónico en metasuperficies

W. Luis Mochán¹ y Merlyn J. Juárez²

*¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México,
Cuernavaca, Mor. México*

*²Centre énergie matériaux télécommunications, Institut national de la recherche scientifique,
Montreal, Canada*

Correo electrónico: mochan@fis.unam.mx

Desarrollamos un formalismo para el cálculo de la generación de segundo armónico óptico en metasuperficies no centrosimétricas. El modelo está basado en sistemas armónicos sujetos a campos electromagnéticos inhomogeneos [1], con fuertes gradientes debidos a la presencia de interfaces. Adaptamos una metodología basada en la recursión de Haydock [2] para obtener eficientemente el campo electromagnético lineal microscópico, y a partir del mismo, la polarización y el campo electromagnético no lineal microscópico y macroscópico, de donde extraemos finalmente la susceptibilidad macroscópica cuadrática del sistema, cuyos espectros muestran estructura asociada a las resonancias de Mie de las partículas que forman la metasuperficie. Obtenemos que la geometría puede conducir a no-linealidades cuadráticas en sistemas hechos de materiales centrosimétricos cuyos valores alcanzan en resonancia a aquellas presentes en materiales no centrosimétricos.

Agradecimientos

WLM agradece el apoyo de DGAPA-PAPIIT mediante el proyecto IN117925.

[1] B. S. Mendoza and W. L. Mochán, Exactly solvable model of surface second-harmonic generation, *Physical Review B* 53, 4999 (1996).

[2] W. Luis Mochán, Andrea López-Reyna and Guillermo P. Ortiz, Efficient homogenization of multicomponent metamaterials: chiral effects, *Phys. Status Solidi B* 2024, 2400526, doi:10.1002/pssb.202400526.

II.5 The Non extensivity parameter as a seismic risk factor

Oscar Sotolongo Costa, Miguel E. Mora-Ramos

CInC, UAEM. Cuernavaca, Morelos, México.

It is known that Tsallis Entropy $S_q = \frac{1 - \sum p_i^q}{q-1}$ is non additive and deals well with systems where long-range correlations and memory effects are present, like earthquakes under the description of the Sotolongo-Posadas model, in which fragment-asperity intertactions are present and the formation of fragments imply increase of surface and consequently, energy liberation.

Here this process is dicused and revealed that q , more than a simple “adjusting parameter”, is a true risk factor of earthquakes occurrence. Calculations show, under SCP description, that mainshocks occur under a given interval of “ q ” which coincide with the q range of maximal entropy variation. The SCP model shows mathematically that Mainshocks are in close connection with the strongest entropy variations. And q is the risk factor of this event. This prediction is supported by a large number of mainshocks measurements.

II.6 Una fórmula para el tiempo de respuesta térmico

Angela Camacho de la Rosa¹, Rolando Pérez Álvarez²

^{1,2}Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209 Cuernavaca, Morelos, México

Correo electrónico:
crangela.74@gmail.com

En este trabajo, utilizamos la teoría de respuesta lineal causal para determinar las reglas de suma asociadas a la susceptibilidad térmica de las ecuaciones de Guyer-Krumhansl y Cattaneo para describir el proceso de conducción de calor. A partir de una de las integrales que constituyen a estas reglas de suma, obtenemos una expresión del tiempo de respuesta térmica asociado a la ecuación de Cattaneo. Esto nos permite obtener valores del tiempo de respuesta para diferentes materiales y analizar las condiciones físicas bajo las cuales la inercia térmica se vuelve relevante para describir el proceso de conducción del calor.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

II.7 Desarrollo de vidrios y vitrocerámicos luminiscentes y su optimización mediante el uso de CaO y cristalización controlada

J. Escorcía-García¹, V.E. Ceniceros-Orozco², C.J. Saucedo-Flores², E. Carrillo-Villarreal², H.U. López-Herrera²

¹*Secihti-Cinvestav, Unidad Saltillo, Av. Industria Metalúrgica 1062, Ramos Arizpe 25900, Coahuila, México.*

²*Cinvestav, Unidad Saltillo, Av. Industria Metalúrgica 1062, Ramos Arizpe 25900, Coahuila, México.*

Correo electrónico: jose.escorcía@cinvestav.edu.mx

La iluminación basada en elementos abundantes y procesos económicos es crucial para reducir el creciente consumo energético de la sociedad en la actualidad. Aunque los LED son los más utilizados debido a su alta intensidad y eficiencia, tienen inconvenientes tales como un alto costo, degradación de la resina polimérica y fallo del chip por sobrecalentamiento, los cuales limitan su uso en aplicaciones de alta potencia. Ante esto, los vidrios y vitrocerámicos luminiscentes dopados con tierras raras han surgido como una alternativa para sustituir la resina polimérica gracias a sus interesantes características, tales como una buena solubilidad de las tierras raras y una excelente estabilidad térmica y química [1].

En la ponencia se presentarán las principales características de los materiales vítreos y vitrocerámicos basados en silicatos y borosilicatos dopados con Dy^{3+} y Sm^{3+} , así como su proceso de fabricación mediante el proceso convencional de fusión-enfriamiento. Asimismo, se presentará la influencia del CaO como óxido modificador en las propiedades fisicoquímicas de los vidrios, particularmente su efecto en el desorden estructural, la anomalía bórica y las propiedades ópticas tales como la intensidad luminiscente, la brecha de energía óptica y la energía de Urbach [2]. Además, se mostrará que es posible controlar el color de la emisión y mejorar la estabilidad térmica luminiscente de los vidrios mediante su cristalización controlada (vitrocerámicos) a fin de obtener luz blanca [3]. Finalmente, se mostrarán algunas aplicaciones de los vidrios y vitrocerámicos luminiscentes y conclusiones.

Agradecimientos: Agradecemos al Secihti (antes Conacyt) por el apoyo otorgado a través de los proyectos CB2016/286160 y PN2016/2738.

[1] J.D. Musgraves, J. Hu, L. Calvez, Handbook of glass, Springer, Switzerland (2019)

[2] V.E. Ceniceros-Orozco, J. Escorcía-García, C.A. Gutiérrez-Chavarría, V. Agarwal, H. Uriel López-Herrera, Orange-reddish photoluminescence enhancement and wollastonite nanocrystals formation induced by CaO in Sm^{3+} -doped calcium sodium borosilicate glasses, Ceram. Int., **48**, 14537 (2022)

[3] A. Santiago de la Rosa, D.A. Cortés-Hernández, J. Escorcía-García, H. Uriel López-Herrera, White-light luminescence from Tm^{3+} -doped borosilicate glass-ceramics synthesized by the sol-gel route, Ceram. Int., **49**, 23985 (2023)

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

II.8 Sintonización de plasmones en bi-capa de grafeno con potenciales químicos asimétricos para aplicaciones en biosensado SPR

Arsenio Sánchez A.^{1,2}, Jesús Madrgal M.², J. Samuel Pérez Huerta², David Ariza F.², I. Aydée Sustaita T.³

¹Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación

²Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia-UAZ

³Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica -UAZ

Correo electrónico: asanchezlumat@uaz.edu.mx

Los plasmones de superficie —colectivos de carga acoplados a ondas electromagnéticas en interfaces metal-dieléctrico— son fundamentales en aplicaciones como biosensores [1]. El grafeno, con sus propiedades ópticas excepcionales, ha revolucionado la plasmónica [2]. En este trabajo, estudiamos el sistema de doble lámina de grafeno separadas por un dieléctrico, donde cada lámina posee un potencial químico distinto, explorando su impacto en la excitación de modos plasmónicos. Mediante el esquema de *matriz de transferencia*, derivamos una ecuación algebraica que describe la excitación de plasmones en el sistema de doble lámina de grafeno. Los resultados revelan que el potencial químico asimétrico entre las láminas actúa como un parámetro de sintonización, modificando la región de excitación de los modos plasmónicos. Asimismo, los cálculos de *reflectividad en configuración ATR* revelan que este sistema podría optimizarse para detectar cambios en el medio dieléctrico adyacente, sugiriendo aplicaciones potenciales como biosensores SPR de alta sensibilidad. La capacidad de controlar independientemente los potenciales químicos en bicapas de grafeno ofrece una vía prometedora para diseñar plataformas plasmónicas para el desarrollo de biosensores SPR con selectividad ajustable, aprovechando las propiedades intrínsecas del grafeno.

Agradecimientos:

El Dr. Arsenio Sánchez Arellano (CVU:785052) agradece a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por otorgarle el apoyo para realizar su estancia de investigación posdoctoral.

[1] Junxi Zhang, Lide Zhang and Wei Xu, Surface plasmon polaritons: physics and applications, Journal of Physics D: Applied Physics, 10.1088/0022-3727/45/11/113001.

[2] Bludov, A primer on surface plasmon-polaritons in graphene, International Journal of Modern Physics B, 10.1142/S0217979213410014.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

II.9 Sensor de bajo costo empleando resonancia de plasmón superficial

R. Hernandez¹, R. Velazquez², J. López², S. Amador¹, J.S. Pérez¹, J. Madrigal¹, I. Sustaita¹, J. Ortega³, V. Castillo⁴, M. Rangel⁴, V. Agarwal⁴, and D. Ariza^{1,2}

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia (LUMAT), Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, C.P. 98160 Zacatecas, México

²División de Investigación y Posgrado, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Cerro de las Campanas s/n, C.P. 76010 Querétaro, Qro., México

³Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Alvaro Obregón 64, San Luis Potosí, SLP 78000, México.

⁴Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, CIICAp. Universidad Autónoma del Estado de Morelos, UAEM, Av. Univ. 1001, Col. Chamilpa, Cuernavaca, Morelos C.P. 62209, México

Correo electrónico: davidlcool@gmail.com

En este trabajo se presenta un sistema experimental económico para la determinación de concentraciones de vapores de etanol, empleando resonancia de plasmón de superficie. El sistema emplea elementos ópticos y electrónicos adquiridos en plataformas digitales ampliamente conocidas (eBay, Amazon, MercadoLibre, etc.), con los cuales se desarrolla un equipo de medición automatizado controlado por computadora. El instrumento se acopla a un sistema generador de vapores mediante una cámara hermética usada como portamuestra en donde se suministran los vapores. Su desempeño es mostrado a través de mediciones de espectros angulares de reflexión total atenuada (ATR) en muestras de estructuras tipo Tamm y la forma de línea se verifica mediante simulaciones empleando el método de matriz de transferencia.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Ing. Avelina Sánchez Ortiz por su valiosa contribución al desarrollo del sistema de gases y la adquisición de mediciones.

- [1] Usman, F., Dennis, J. O., Mkawi, E. M., Al-Hadeethi, Y., Meriaudeau, F., Fen, Y. W.,... & Sulieman, A. Acetone vapor-sensing properties of chitosan-polyethylene glycol using surface plasmon resonance technique. *Polymers*, **12**(11), 2586 (2020).
- [2] Abdelhamid, A. A., Kerrigan, D., Koopman, W., Werner, A., Givens, Z., & Donev, E. U. Surface plasmon resonance sensing in the advanced physics laboratory. *American Journal of Physics*, **90**(11), 865-880 (2022).
- [3] Pluchery, O., Vayron, R., & Van, K. M. Laboratory experiments for exploring the surface plasmon resonance. *European journal of physics*, **32**(2), 585 (2011).

II.10 Transferencia radiativa de calor en cristales plasmónicos de sub-longitud de onda

S. G. Castillo-López¹, S. Cortés-López², D. N. Castillo-López³

¹ *Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 Mexico, Mexico.*

² *Tecnológico Nacional de México/ ITS de Poza Rica, Luis Donaldo Colosio Murrieta S/N, Arroyo del Maíz, 93230 Poza Rica, Mexico.*

³ *Facultad de Ciencias de la Electrónica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Mexico*
Correo electrónico: shunashi@fisica.unam.mx

La transferencia radiativa de calor es un fenómeno ubicuo en la naturaleza causado por fluctuaciones de origen térmico del campo electromagnético. En el campo cercano, la transferencia radiativa de calor entre algunos materiales puede exceder el límite predicho por la ley de Stefan-Boltzmann para un emisor ideal. En esos casos, la transferencia radiativa de calor de campo cercano (NFRHT) es mediada principalmente por modos evanescentes del campo electromagnético y depende significativamente de la respuesta dieléctrica de los materiales. De esta manera, se vuelve posible controlar el flujo de calor intercambiado entre dos cuerpos no sólo a través de sus temperaturas, sino también modificando sus propiedades ópticas [1]. En este trabajo, se presenta un estudio teórico del manejo de la NFRHT mediante la nanoestructuración de los materiales, en particular, se analizarán dos casos: 1) metasuperficies basadas en grafeno y 2) hiper cristales plasmónicos. En ambos casos, la variación de parámetros geométricos y dieléctricos de sus componentes permite el control pasivo y activo de la transferencia de calor en el campo cercano, donde en el primer caso la contribución principal a la transferencia de calor proviene de modos de superficie plasmónicos, modos epsilon casi cero y modos hiperbólicos en menor proporción [2]; mientras que en el segundo caso son los modos hiperbólicos quienes aumentan hasta casi un orden de magnitud el flujo de calor.

Agradecimientos

S.G.C-L, S.C.L, y D.N.C-L agradecen el apoyo financiero de la UNAM DGAPA PAPIIT Proyecto No. TA10072

- [1] S. G. Castillo-Lopez, R. Esquivel-Sirvent, C. Villarreal, G. Pirruccio. Near-field radiative heat transfer management by subwavelength plasmonic crystals, *Appl. Phys. Lett.* **121**, 201708 (2022).
- [2] S. G. Castillo-López, S. Cortés-López 2, D. N. Castillo-López, Control of the near-field radiative heat transfer between graphene-coated nanoparticle metasurfaces, *Scientific Reports* **14**, 18316, (2024).

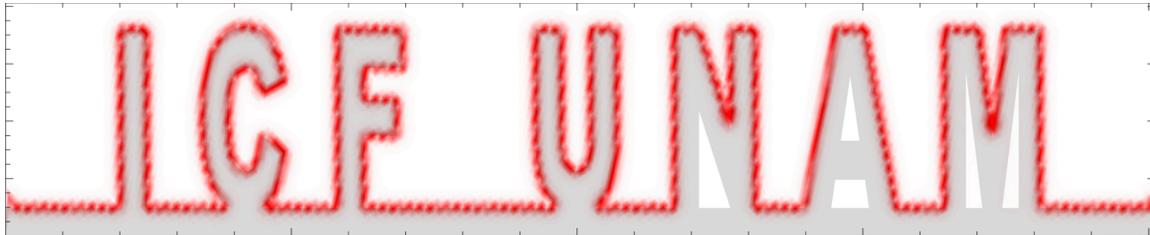
III.1 Control del transporte electrónico en materiales cuánticos bidimensionales

Thomas Werner Stegmann

¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210 Cuernavaca, México

Correo electrónico: *stegmann@icf.unam.mx*

En esta charla exploramos diversas estrategias para manipular y controlar el transporte electrónico en materiales cuánticos bidimensionales, con énfasis en el grafeno. Mostramos que las distorsiones de tipo Kekulé en el grafeno permiten guiar la corriente a lo largo de trayectorias bien definidas, como se ilustra en la figura adjunta, donde la corriente forma las letras de ICF-UNAM. Al considerar una bi-capa de grafeno, demostramos que es posible desviar la corriente mediante la rotación relativa entre las capas. Además, discutimos la aparición de estados de borde anómalos en este sistema, los cuales abren nuevas posibilidades para el control del transporte. Finalmente, mostramos que estas estrategias no se limitan al grafeno, sino que pueden extenderse a otros materiales bidimensionales, como el fosforeno, abriendo nuevas posibilidades para el diseño de dispositivos electrónicos cuánticos.



III.2 Coeficiente de absorción intrabanda para puntos cuánticos multicapa GaAs/Al_xGa_{1-x}As oblatos, esférico y prolato

A. Astrain-Ortega^{1,2}, K. A. Rodríguez-Magdaleno^{3,4}, F. M. Nava-Maldonado³, C. A. Duque⁵, I. Rodríguez-Vargas², J. C. Martínez-Orozco²

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160 Zac., Zacatecas, México.

²Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas. Calzada Solidaridad esquina con Paseo La Bufa S/N. C.P. 98060, Zac., Zacatecas, México.

³Unidad Académica de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Zacatecas. Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido la Escondida, 98160, Zac., Zacatecas México.

⁴Laboratorio de Ciencias Forenses, Universidad Autónoma de Zacatecas. Ramón López Velarde 117, Lomas del Patrocinio, 98068, Zac., Zacatecas, México.

⁵Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.

Correo electrónico: jcmartinez@uaz.edu.mx

Las propiedades ópticas de los puntos cuánticos han atraído un interés significativo debido a sus implicaciones en la física fundamental y sus posibles aplicaciones en dispositivos. Los puntos cuánticos, que son sistemas sintetizados experimentalmente con gran calidad —como lo confirma el Premio Nobel de Química 2023—, han sido utilizados en diversos dispositivos, incluyendo celdas solares de puntos cuánticos, sistemas de información cuántica y aplicaciones de bioimagen. Entre las diversas posibles heteroestructuras de puntos cuánticos, nuestro enfoque se centra en semiconductores del grupo III-V, específicamente puntos cuánticos de múltiples capas GaAs/AlGaAs con geometrías oblatas, esféricas y prolatas. En este estudio, presentamos hallazgos teóricos basados en la aproximación de masa efectiva. Investigamos el elemento de matriz dipolar intrabanda y el coeficiente de absorción correspondiente, explorando su comportamiento bajo campos eléctricos y magnéticos. Nuestro principal descubrimiento es el potencial de diseñar una estructura optimizada de punto cuántico de múltiples capas. Esta estructura puede ajustarse finamente mediante campos eléctricos y magnéticos, lo que da como resultado una respuesta óptica adecuada para transiciones intrabanda en el rango de terahercios del espectro electromagnético.

IV.1 Recent Developments in Vapor Phase Techniques for the Growth of Molybdenum Oxides Compounds

Oswaldo de Melo

Escuela Superior de Física y Matemáticas y Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Instituto Politécnico Nacional, 07738, Ciudad de México

The ability to synthesize MoO_x compounds with different proportions of molybdenum and oxygen and different Mo valences, spanning from MoO_2 (IV) to MoO_3 (VI) oxide, and including the non-stoichiometric Magnelli phases ($\text{Mo}_n\text{O}_{3n-1}$ with $n=1,2,3\dots$), allows their use in a wide range of applications including energy, electronics, photocatalysis, and even in optical, and biological fields [1,2]. In this talk, I will review recently developed vapor phase techniques for the growth of various compounds of the MoO_x family with different morphologies including epitaxial flakes [3], films [4] and rods of MoO_2 , cauliflowers like Mo_4O_{11} [5], layered MoO_3 crystals [6], $\text{MoO}_3/\text{Mo}_5\text{O}_{14}$ composites [7], as well as spatially resolved MoO_x phases by laser localized oxidation of MoO_2 [8]. The mechanisms favoring the formation of one or the other phase or morphology, and their relationship with the preparation parameters are explored in each case using chemical- physical analysis (Gibbs free energy considerations or Density Functional Theory) of the phase or morphology stability. Finally, some insights into applications of $\text{MoO}_3/\text{MoO}_2$ junctions for gas sensing are presented.

- [1] I.A. de Castro et al., Molybdenum Oxides – From Fundamentals to Functionality, *Advanced Materials* 29 (2017) 1701619.
- [2] O. Concepción, O. de Melo, The versatile family of molybdenum oxides: synthesis, properties, and recent applications, *J. Phys.: Condens. Matter* 35 (2023) 143002.
- [3] O. de Melo et al., Interfacial strain defines the self-organization of epitaxial MoO_2 flakes and porous films on sapphire: experiments and modelling, *Applied Surface Science* 514 (2020) 145875.
- [4] O. de Melo et al., Chemically driven isothermal closed space vapor transport of MoO_2 : thin films, flakes and in situ tellurization, *J. Mater. Chem. C* 6 (2018) 6799–6807.
- [5] O. de Melo et al., Carbon-Assisted Isothermal Close Space Vapor Transport Growth of Mo_4O_{11} and MoO_2 Micro/Nanostructures by in Situ Formation of the $\text{Mo}(\text{CO})_6$ Transport Agent, *J. Phys. Chem. C* 127 (2023) 20113–20120.
- [6] C. Calvo-Mola et al., Temperature dependence of Raman and photoluminescence spectra of pure and high-quality MoO_3 synthesized by hot wall horizontal thermal evaporation, *Journal of Alloys and Compounds* 924 (2022) 166545.
- [7] Y.L. Leibas, et al., Selective deposition of $\text{Mo}_5\text{O}_{14}/\text{MoO}_3$ composite onto MoO_2 surfaces induced by $\text{MoO}_3/\text{MoO}_2$ interfacial reaction, *Journal of Solid State Chemistry*, 343 (2025), 125166,
- [8] O. de Melo et al., Spatially resolved MoO_x phases by the laser oxidation of MoO_2 : a possible route for all-molybdenum oxide devices, *J. Mater. Chem. C* 9 (2021) 6579–6588.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

IV.2 Aplicación de la aperiodicidad en dispositivos espín-valletrónicos basados en siliceno: Secuencia de Kolakoski

J.G. Rojas-Briseño¹, P. Villasana-Mercado¹, S. Molina-Valdovinos¹, R. Rodríguez-González¹, I. Rodríguez-Vargas¹

¹*Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del conocimiento, 98160, Zacatecas, Zacatecas, México.*
jgrojas@uaz.edu.mx

La búsqueda de dispositivos versátiles en materiales bidimensionales ha sido la tarea que hemos estado desarrollando en los últimos años. Un dispositivo versátil es aquel que presenta regiones planas perfectas de polarización de valles y espín, así como una alta respuesta magnetorresistiva (TMR). En el presente trabajo nos enfocaremos en el siliceno. D. Wang et al., fue el primero en presentar un dispositivo simple, unión magnética asimétrica basada en siliceno [1], en donde obtuvo regiones de polarización neta de valle y espín, así como una alta TMR. Los resultados obtenidos por D. Wang fueron mejorados proponiendo una superred periódica magnética, en donde la asimetría del sistema es esencial [2]. Después, con el fin de encontrar un dispositivo que supere los resultados en la superred periódica, el grupo de investigación miró hacia los sistemas aperiódicos como las secuencias de Fibonacci y Thue-Morse [3] y Cantor [4]. En base a lo anterior, en el presente trabajo presentamos los resultados obtenidos al aplicar la secuencia de Kolakoski para generar una superred aperiódica [5]. Hasta el momento es la estructura que ha presentado los mejores resultados.

Agradecimientos

J.G.R.-B.: Secretaria de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI), por la estancia postdoctoral 413545.

- [1] D. Wang, Z. Huang, Y. Zhang, and G. Jin, Spin-valley filter and tunnel magnetoresistance in asymmetrical silicene magnetic tunnel junction, *Phys. Rev. B* **93**, 195425 (2016)
- [2] J.G. Rojas-Briseño, M.A. Flores-Carranza, P. Villasana-Mercado, S. Molina-Valdovinos, and I. Rodríguez-Vargas, Tunneling magnetoresistance and spin-valley polarization in magnetic silicene superlattices, *Phys. Rev. B* **103**, 155431 (2021)
- [3] P. Villasana-Mercado, J.G. Rojas-Briseño, S. Molina-Valdovinos, and I. Rodríguez-Vargas, Tunneling magnetoresistance and spin-valley polarization of aperiodic magnetic silicene superlattices, *J. Phys.: Condens. Matter* **35**, 085302(2023).
- [4] R. Rodríguez-González, L.A. Díaz-Valerio, S. Molina-Valdovinos, and I. Rodríguez-Vargas, Optimization of the tunneling magnetoresistance and spin-valley polarization in complex magnetic silicene structures, *J. Appl. Phys.* **134**, 044302 (2023).

IV.3 Transporte cuántico fractal en estructuras Cantor de grafeno: análisis del espectro de potencia

R. Rodríguez-González,¹ R. D. Valdez-Cepeda,^{2,3} and I. Rodríguez-Vargas¹

¹*Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia,
Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N,
Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160 Zacatecas, Zacatecas,
México.*

²*Centro Regional Universitario Norte Centro, Universidad Autónoma
Chapingo, Apartado Postal 196, 98001, Zacatecas, México.*

³*Unidad Académica de Matemáticas, Universidad Autónoma de Zacatecas,
Calzada Solidaridad S/N, 98064 Zacatecas, Zacatecas, Mexico.
Correo electrónico: rogeliorg@uaz.edu.mx*

Las estructuras fractales de grafeno son sistemas ideales para analizar el impacto de las geometrías auto-similares en las propiedades físicas. En este trabajo, estudiamos el transporte electrónico en estructuras Cantor de grafeno. Se utiliza un esquema de transmisión para dicho transporte. En particular, implementamos el formalismo de Landauer-Büttiker para calcular la conductancia en el régimen lineal para diferentes generaciones de la estructura Cantor. La fractalidad de las curvas de conductancia se determina mediante el análisis del espectro de potencia, mientras que la fractalidad del perfil de potencial tipo Cantor se calcula con el método de conteo de cajas. Nuestros resultados muestran que la fractalidad de las curvas de conductancia está estrechamente relacionada con la fractalidad del perfil de potencial tipo Cantor. Además, el análisis del espectro de potencia de las curvas de conductancia nos permite determinar las energías de Fermi dominantes del transporte electrónico en este tipo de estructuras fractales. Estas energías de Fermi están relacionadas con las estructuras periódicas embebidas intrínsecas a las estructuras Cantor de grafeno. Hasta donde sabemos, este es el primer trabajo que utiliza el análisis del espectro de potencia para comprender el transporte electrónico en estructuras fractales de grafeno.

IV.4 Termo-reflectancia de Materiales no-Fourier en el Dominio de la Frecuencia

A. Camacho de la Rosa¹, R. Esquivel Sirvent², D. Becerril³

¹*CEIC, Universidad Autónoma del Estado de Morelos*

²*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México*

³*Istituto di Struttura della Materia, Roma, Italia.*

Correo electrónico: raul@fisica.unam.mx

La termo reflectancia es una técnica utilizada para determinar la conductividad térmica de materiales midiendo la diferencia de fase de una señal óptica reflejada de la muestra. En general se supone que los materiales bajo estudio siguen la ley de Fourier de conducción térmica. En esta plática presentamos un estudio teórico de cómo se puede estudiar los materiales que no siguen la ley de Fourier. Los materiales de no-Fourier exhiben un retraso en el tiempo en la conductividad térmica, al aplicar un gradiente de temperatura. Calculando la fase adquirida en la señal óptica entre los dos casos, así como el campo de temperatura, mostramos que la termo reflectancia en frecuencia tiene la sensibilidad para detectar materiales de no Fourier y permite determinar no solo la conductividad térmica pero los tiempos característicos de respuesta de estos materiales [1].

Agradecimientos

-CONACHCyT becas postdoctoral I1200/311/2023

[1] A. Camacho de la Rosa, R. Esquivel Sirvent, D. Becerril, Relaxation Time of non-Fourier materials using frequency-domain thermorefectance, J. App. Phys. **Vol. 137** (2025).

IV.5 Surface photovoltage spectroscopy, a powerful technique for characterization of materials and devices

Maria Sánchez Colina

Faculty of Physics. University of Havana. San Lázaro and L, Vedado, 10400.

La Habana, Cuba

E mail: maruchy@fisica.uh.cu

Surface photovoltage spectroscopy (SPS) has become an important tool for characterizing semiconductor materials. This technique relies on measuring changes in surface voltage in response to external illumination, providing information on fundamental semiconductor parameters such as bandgap energy and minority carrier diffusion length. SPS is also useful for gaining information about buried interfaces in heterostructures, providing a detailed picture of their band diagram.

This talk reviews the physical principles and experimental details of SPS. Results obtained in the characterization of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ self-assembled nanostructures¹ and MoO_3 thin films grown onto silicon substrates² are presented. We also present the temperature dependence of surface photovoltage (SPV) in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum wells. Measurements were taken between 20 and 275 K with quantum well transitions identified in the spectra at room temperature. All measurements were performed using a lab-made experimental setup³. We present an original application of SPV for characterizing fully metallized $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ laser diodes. SPS was also employed to conduct a thorough investigation into the efficacy of various texturing and passivation schemes for the fabrication of black silicon solar cells, demonstrating its potential for monitoring the manufacturing process of these cells step by step⁴.

References

1. Mater Sci. Semicond. Process. 150, 106946 (2022)
2. Journal of Alloys and Compounds. 924, 166545 (2022)
3. Rev. Sci. Instrum., 92, 013104 (2021)
4. Solar Energy Materials & Solar Cells 282, 113324 (2025)

IV.6 Análisis del transporte cuántico y la polarización espín-valle en estructuras ferromagnéticas de borofeno 8-Pmmn

Y. Y. Huamani Tapia, Rodríguez-Vargas, J. G. Rojas-Briseño, S. Molina-Valdovinos

*Unidad Académica de Ciencias y tecnología de la Luz y la Materia
Universidad Autónoma de Zacatecas*

El borofeno 8-Pmmn es un material 2D muy atractivo tanto desde el punto de vista fundamental como tecnológico. Su estructura de banda inclinada da lugar a fenómenos exóticos como el túnel oblicuo de Klein y su dependencia direccional de la unión cerrada representa un grado de libertad adicional que puede utilizarse para modular el transporte electrónico espín-valle.

La polarización de espín y valle es posible en uniones ferromagnéticas de borofeno 8-Pmmn mediante el control preciso del vector de onda transversal, así como mediante la sintonización adecuada de la compuerta electrostática y magnética. Aquí, mostramos que cuando sólo se aplica la magnetización, la polarización de valle no es posible cuando se consideran todos los vectores de onda transversales debido a la equivalencia entre los componentes de conductancia de valle. Por el contrario, la diferencia entre los componentes de conductancia de espín da lugar a regiones de energía de Fermi de polarización de espín casi perfecta. Estas regiones pueden aumentarse colocando las puertas ferromagnéticas en dirección oblicua. También se puede acceder a estados de polarización de espín positivos y negativos perfectos invirtiendo la dirección de magnetización. La degeneración de valle se elimina considerando un campo magnético externo, generando regiones de polarización de valle perfecta positiva y negativa. Cuando el campo magnético externo y la magnetización se consideran simultáneamente, la degeneración de la conductancia espín-valle se rompe permitiendo regiones simultáneas de espín perfecto y polarización de valle perfecta. Estos resultados indican que las uniones ferromagnéticas de borofeno 8-Pmmn podrían ser la base para aplicaciones de dispositivos espintrónicos y valletrónicos.

Agradecimientos

Y. Y. H-T agradece a SecihtiMéxico por la beca de estudios de doctorado. J.G. R.-B. agradece a SecihtiMéxico por la Beca de Investigación Postdoctoral con referencia 413545 y a la Universidad Autónoma de Zacatecas por la hospitalidad.

IV.7 Transporte electrónico y tunelaje anti-súper-Klein en un sistema de fósforo negro de pocas capas

Thomas Stegmann¹, Armando Arciniega-Gutiérrez², Yonatan Betancur-Ocampo², Jorge Lizarraga¹

1Instituto de ciencias física, Universidad Nacional Autónoma de México

2Instituto de física, Universidad Nacional Autónoma de México

E-mail: jorge.lizarraga@icf.unam.mx

El transporte electrónico en un sistema de pocas capas de fósforo negro, caracterizado por tener electrones con alta movilidad y una brecha de banda intrínseca [1-3], es analizado teóricamente utilizando el método numérico de funciones de Green fuera del equilibrio modelando el Hamiltoniano con amarre fuerte considerando hasta los cuartos vecinos más próximos entre sí. Los valores de los parámetros de los enlaces fueron obtenidos de los resultados experimentales de realizados con μ -ARPES [4]. La anisotropía de la estructura de bandas del sistema es confirmada para este sistema, dando paso a fenómenos como el super-tunelaje y anti-super-tunelaje de Klein según sea la incidencia de los electrones cuando parte del sistema está bajo la influencia de un potencial. Adicionalmente, los efectos de la oxidación en la capa superior del sistema son explorados, mostrando una reducción del transporte del sistema, pero una mejora del anti-supertunelaje de Klein.

Agradecimientos

JALB agradece y reconoce el apoyo económico de DGAPA-UNAM durante esta investigación y el proyecto UNAMPAPIIT IG100725.

Todos los autores agradecen y reconocen el apoyo económico de CONACYT Proyecto A1-S-13469, UNAM-PAPIIT IN103922 y IA106223.

[1] A. Carvalho, M. Wang, X. Zhu, A. S. Rodin, H. Su, and A. H. C. Neto, Phosphorene: from theory to applications, *Nat. Rev. Mater.* 1, 16061 (2016).

[2] W. Zhang, X. Zhang, L. K. Ono, Y. Qi, and H. Oughaddou, Recent advances in phosphorene: Structure, synthesis, and properties. *Small* 20, (2024).

[3] L. Ding, P. Shao, Y. Yin, and F. Ding, Synthesis of 2d phosphorene: Current status and challenges. *Advanced Functional Materials* 34 (2024).

[4] F. Margot, S. Lisi, I. Cucchi, E. Cappelli, A. Hunter, I. Gutiérrez-Lezama, K. Ma, F. von Rohr, C. Berthod, F. Petocchi, S. Ponc'e, N. Marzari, M. Gibertini, A. Tamai, A. F. Morpurgo, and F.

Baumberger, Electronic structure of few-layer black phosphorus from μ -arpes. *Nano Letters* 23, 6433 (2023).

IV.8 Acoplamiento fuerte entre excitones y fotones guiados en estructuras de WS₂-hBN

P. L. Valdés-Negrin¹, W. Luis Mochán¹

*¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Avenida Universidad s/n, 62210 Cuernavaca, Morelos, México
pvaldes@icf.unam.mx*

Analizamos los espectros ópticos de estructuras fotónicas basadas en películas de nitruro de boro hexagonal (hBN) con monocapas excitónicas de WS₂ embebidas, diseñadas para optimizar la interacción luz-materia y maximizar el desdoblamiento de Rabi. Las estructuras están confinadas entre capas dieléctricas de dióxido de silicio y son excitadas mediante prismas de Si en configuración de reflexión total atenuada (ATR). Observamos resonancias debidas al acoplamiento fuerte entre excitones y modos guiados, así como a la dispersión introducida por los prismas. Para una estructura sencilla de cinco celdas apiladas ($L = 1050$ nm), se obtuvo un desdoblamiento de Rabi de 238.2 meV, superior al de sistemas híbridos más complejos [1]. Al optimizar la posición de las monocapas excitónicas, se lograron tres resonancias bien definidas con desdoblamientos de hasta 382.2 meV en estructuras más delgadas que contenían solo dos monocapas de WS₂. Estos resultados demuestran el potencial de estas configuraciones para aplicaciones en dispositivos polaritónicos.

Agradecimientos

Este trabajo contó con el apoyo de PAPIT-UNAM (proyectos IN-109822 e IN117925). P.L.V.-N. agradece el apoyo del programa de becas posdoctorales de la DGAPA-UNAM.

[1] K. As'ham, I. Al-Ani, M. Alaloul, S. Abdo, A. Abdulghani, W. Lei, H. T. Hattori, L. Huang, and A. E. Miroshnichenko, *Physical Review Applied* **19**, 054049 (2023).

**V.1 Bidirectional Traffic Flow with Lane-Changing and Autonomous Agents:
A Cellular Automata-Based Study of Emissions and Phase Transitions**

Noureddine Lakouari^{1,2,*}, Rachid Marzoug³, José Roberto Pérez Cruz¹

¹Department of Computer Science, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE), Puebla 72840, México

²Secretaría de Ciencias, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI), Ciudad de México 03940, México

³Centro Universitario del Norte, Universidad de Guadalajara, Colotán 46200, México
Correo electrónico: n.lakouari@inaoe.mx

En este trabajo proponemos un modelo de autómatas celulares bidireccional con dos carriles que considera dos tipos de vehículos: autónomos y convencionales. El modelo permite simular dinámicas realistas de tráfico, incluyendo adelantamientos y congestiones, en un entorno donde ambos tipos de vehículos interactúan. Se construyen diagramas de fase y representaciones espacio-temporales para caracterizar el comportamiento macroscópico del sistema. Los resultados muestran que al aumentar la proporción de vehículos autónomos, se incrementa el flujo vehicular, disminuye la frecuencia de atascos y se reduce significativamente tanto la emisión de gases contaminantes como la disipación energética. Asimismo, se calcula la entropía de Shannon de las trayectorias vehiculares, observándose una transición desde un comportamiento altamente caótico a uno más organizado conforme crece la presencia de vehículos autónomos.

V.2 Eficiencia versus potencia en superredes aperiódicas tipo Fibonacci de bicapa de grafeno

J. A. Briones-Torres¹, R. Rodríguez-González², R. Pérez-Álvarez³, S. Molina-Valdovinos², I. Rodríguez-Vargas²

¹Universidad de La Ciénega del Estado de Michoacán de Ocampo, Ingeniería en Nanotecnología, Avenida Universidad 3000, Col. Lomas de la Universidad 59103, Sahuayo, Michoacán, México. ²Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160, Zacatecas, Zacatecas, México.

³Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Centro de Investigación en Ciencias, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

Correo electrónico: jabriones@ucemich.edu.mx

Presentaremos el estudio del transporte electrónico y de las propiedades termoeléctricas en superredes aperiódicas tipo Fibonacci basadas en bicapa de grafeno. Emplearemos el método estable de la matriz híbrida para calcular la transmitancia y los coeficientes del transporte, cálculos necesarios para la obtención de las curvas de eficiencia versus potencia máxima. Sistemas aperiódicos como el Fibonacci exhiben una transmitancia fuertemente fragmentada y dependiente del ángulo de incidencia electrónico, lo cual impacta de manera no trivial la conductancia [1]. Nos enfocaremos en la búsqueda de condiciones que optimicen simultáneamente la eficiencia termoeléctrica y la potencia de salida, identificando ventanas energéticas que favorezcan ambos parámetros de manera conjunta [2,3]. Estos resultados son clave para el diseño de dispositivos termoeléctricos en el régimen cuántico.

Agradecimientos

A la Universidad de La Ciénega del Estado de Michoacán de Ocampo por el apoyo otorgado a través de la convocatoria de Apoyo Individual para la Formación Continua y Difusión de la Investigación.

- [1] Mukhopadhyay, S., Biswas, R., & Sinha, C. (2010). Resonant tunnelling in a Fibonacci bilayer graphene superlattice. *physica status solidi (b)*, **247**(2), 342-346.
- [2] Whitney, R. S. (2014). Most efficient quantum thermoelectric at finite power output. *Physical review letters*, **112**(13), 130601.
- [3] Mukherjee, S., & Muralidharan, B. (2019). Electronic Fabry-Perot cavity engineered nanoscale thermoelectric generators. *Physical Review Applied*, **12**(2), 024038.

**V.3 The investigation of optical and photocatalytic properties in $Dy_2 M_2 O_7$
(M=Hf, Zr and Ce)**

H. Zaari¹, K. Ouassoul¹, F. Mezzat¹, F. Elyahyaoui¹, A. El Kenz¹, A. Benyoussef²

¹*Mohammed V University in Rabat, Faculty of Science, Condensed Matter Laboratory and Interdisciplinary Sciences (LaMCSl), Rabat, Morocco*

²*Hassan II Academy of Sciences and Techniques, Rabat, Morocco*

Correo electrónico: ouassoulkhaoula@gmail.com

This work aims to present a group of compounds $Dy_2M_2O_7$ (with M = Hf, Ce and Zr) which could be an alternative having the same function as TiO_2 . Based on our studies and those reported in the literature, we will discuss in detail the roles and the functional mechanism of the catalysts. The results show that $Zr_2Dy_2O_7$ is the best candidate to be a photo-catalyst: it has a band gap close to 2.2 eV, and a good absorption in visible range compared to the other compounds having absorption in UV. The quantum efficiency of $Zr_2Dy_2O_7$ reaches up to 3%, and the conduction and valence band limits are localized in a potential redox zone. Doping with Cerium gives another energy level, which allows having other optical transitions and improving the absorption and reaching the quantum efficiency to 4% in a visible range[1].

[1] Zaari, H., Ouassoul, K., Mezzat, F., Elyahyaoui, F., Kenz, A. E., & Benyoussef, A. (2023). The investigation of optical and photocatalytic properties in $Dy_2 M_2 O_7$ (M= Hf, Zr and Ce). *Revista mexicana de física*, 69(1).

V.4 Autómatas celulares para la optimización de emisiones de tráfico y la dinámica del flujo en sistemas de dos rutas mediante retroalimentación de información

R. Marzoug¹ , B. Castillo Téllez² , G.A. Mejía Pérez³ , M. Castillo Téllez⁴

¹Centro Universitario del Norte, Universidad de Guadalajara, Colotlán Jalisco.

²Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara, Tonalá, Jalisco

³Centro Universitario de Tlaquepaque, Universidad de Guadalajara, Tlaquepaque, Jalisco

⁴Facultad de ingeniería, Universidad Autónoma de Campeche, Campeche.

Correo electrónico: rachid.marzoug@academicos.udg.mx

Este estudio utilizó un modelo de autómatas celulares para optimizar las emisiones vehiculares y la dinámica del flujo de tráfico en sistemas con dos rutas, implementando distintas estrategias de retroalimentación de información. A diferencia de investigaciones anteriores, se consideraron factores como el número de vehículos en espera, tasas de entrada (α) y salida (β), cambios de carril y semáforos. Los resultados muestran que priorizar la retroalimentación desde la entrada del sistema es más efectivo para reducir las emisiones que considerar la retroalimentación de todo el sistema. La estrategia más eficaz fue la de retroalimentación por número de vehículos (VNFS), ya que disminuyó los vehículos en espera y, por tanto, las emisiones de CO₂. Las simulaciones también revelaron que, con tasas de entrada menores a 0.4, los cambios de carril asimétricos generan más emisiones, mientras que, por encima de ese valor, los cambios simétricos las incrementan más. En general, el estudio ofrece aportes relevantes para la gestión del tráfico y la reducción de emisiones, con aplicaciones potenciales en sistemas inteligentes de transporte.

V.5 Absorción óptica en puntos cuánticos de InP/ZnS biofuncionales

**Angie Prada-Urrea¹, Claudia Echeverri-Cuartas¹, Natalia Agudelo-Pérez¹,
R. L. Restrepo¹, A. L Morales², C. A Duque²**

¹Universidad EIA, C.P. 055428 Envigado, Colombia.

²Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín 050010, Colombia

Correo electrónico: ricardo.restrepo@eia.edu.co

Los puntos cuánticos de InP (QDs) exhiben propiedades optoelectrónicas que los convierten en candidatos prometedores para el desarrollo de plataformas avanzadas de biosensores ópticos. La biofuncionalización de estos semiconductores puede lograrse utilizando biomateriales comúnmente empleados en las ciencias de la vida para propósitos diagnósticos. Este estudio examina cómo una capa de biomaterial funcional afecta las propiedades electrónicas y ópticas de los puntos cuánticos esféricos de InP/ZnS. Utilizando aproximaciones de masa efectiva y banda parabólica, resolvimos la ecuación de Schrödinger para un electrón confinado mediante el método de elementos finitos (FEM). Nuestros resultados indican que los cambios en los tamaños del núcleo de InP, la capa de ZnS y los parámetros del potencial de confinamiento de la capa de biomaterial influyen en los niveles de energía de los electrones y en el espectro de absorción óptica. Descubrimos que ajustar los parámetros de potencial de confinamiento permite la modulación de las energías de los estados fundamentales y excitados, sintonizando así las amplitudes y posiciones de los picos en las propiedades ópticas. Este control preciso sobre las características de los puntos cuánticos es prometedor para optimizar el rendimiento de los dispositivos en aplicaciones de biosensores ópticos. La mayor sensibilidad y especificidad en la detección de biomoléculas podría revolucionar los diagnósticos biomédicos, permitiendo una detección rápida y precisa de enfermedades o biomarcadores [1].

Agradecimientos

A la Universidad EIA, Colombia, a través del proyecto "Simulación por el método de elementos finitos de las respuestas ópticas de nanoestructuras semiconductoras aplicadas en imágenes médicas" (Código: INVIM0442023). A las agencias colombianas: CODI-Universidad de Antioquia (Estrategia de Sostenibilidad de la Universidad de Antioquia, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales-Universidad de Antioquia (proyecto de dedicación exclusiva de C.A.D. y A.L.M. 2025-2026).

[1] Sabah, A.; Tasleem, S.; Murtaza, M.; Nazir, M.; Rashid, F. Effect of polymer capping on photonic multi-core-shell quantum dots CdSe/CdS/ZnS: Impact of sunlight and antibacterial activity. The Journal of Physical Chemistry

**VI.1 Personal reflections on the past and future of the dialogue between experiment and
(*ab initio*) computation.**

Stefaan Cottenier¹

¹ *Center for Molecular Modeling–Ghent University, Belgium.*

Having spent the past 30 years to calculating properties of crystals by solving the fundamental equations of quantum physics on a computer, and with the aim of providing useful information to experimental colleagues, I will reflect on the drivers that enabled the enormous progress during these decades. The next 30 years will be entirely different, but lessons learned in the past are still relevant to be better prepared for this future. The story will be illustrated by many examples taken from research and teaching, and will hopefully trigger discussions about the path that lies ahead.

VI.2 Efectos de cubrir una superficie de titanio con una capa de carbono en la adsorción de monóxido de nitrógeno, dióxido de nitrógeno, ozono y formaldehído.

Mónica Araceli Canales Lizaola¹, A. Marcos², A. Zárate², L. F. Magaña²

¹ *Tecnológico de Monterrey*; ² *Instituto de Física–UNAM*.

Entre los materiales más utilizados hoy en día se encuentra el titanio, cuyas propiedades permiten su uso en diversas aplicaciones químicas, médicas y militares. Nos interesa estudiar el efecto sobre la adsorción de contaminantes en una superficie de titanio prístina, así como los efectos en la adsorción de estas moléculas contaminantes cuando esta superficie se recubre con una capa de carbono.

Investigamos la adsorción de cuatro moléculas contaminantes (monóxido de nitrógeno, dióxido de nitrógeno, ozono y formaldehído) en la superficie [0001] de titanio decorada con una capa de carbono. La superficie consiste en cuatro capas de titanio. Se utilizó la teoría del funcional de densidad (DFT) y dinámica molecular de primeros principios (AIMD) bajo condiciones de presión atmosférica y 300 K. Encontramos que las cuatro moléculas se quimisorbieron en la superficie prístina [0001] de titanio. Después, por medio de una optimización, hicimos interaccionar la superficie prístina de titanio con una capa de carbono, encontrando que los átomos de carbono se unen a los átomos de titanio en la superficie formando cadenas casi lineales. La energía de adsorción por átomo de carbono es de -2.054 eV, sin migración de los átomos de carbono hacia la parte interna de la superficie de titanio. Descubrimos cambios significativos en las propiedades de adsorción: el nuevo sistema repele las moléculas de formaldehído y óxidos de nitrógeno. En el caso del ozono, hay quimisorción de un átomo de oxígeno en la superficie, mientras que la molécula de oxígeno restante es repelida. En el caso del dióxido de nitrógeno, hay quimisorción de un átomo de oxígeno en la superficie y la fracción restante también es repelida. Los cálculos se realizaron con Quantum ESPRESSO, utilizando GGA, y posteriormente VdW–DF2, que incluye efectos de correlación de largo alcance, obteniéndose los mismos resultados.

VI.3 Conductividad y propiedades ópticas en MXenos.

Nadxieli Delgado Jiménez¹

¹ *Tecnológico de Monterrey.*

Se realizaron cálculos *ab initio* basados en la teoría de la funcional de la densidad (DFT) empleando los programas computacionales Quantum Espresso y Wannier90. Estos cálculos permitieron determinar las bandas de energía, las propiedades ópticas y la conductividad eléctrica del carburo de molibdeno. Los resultados se compararon con los obtenidos previamente para carburos planares de niobio y estaño, analizados bajo las mismas condiciones y utilizando los mismos programas.

Los MXenos considerados tienen un potencial destacado en aplicaciones como sensores, lo que hace especialmente relevante investigar su interacción con moléculas como CO₂, CO, entre otras. Además, los tres carburos presentan propiedades ópticas ideales para su uso en optoelectrónica, ya que son materiales semiconductores. La caracterización de los carburos planares es esencial para explorar una gama más amplia de aplicaciones, aprovechando sus propiedades específicas.

VI.4 Una comparación entre metodologías para la predicción de la inhibición de la corrosión en acero.

Alan Miralrio¹, Carlos Beltran¹, Andrés A. A. Abundis-Serrano¹

¹ *Tecnológico de Monterrey*

Recientemente se han probado moléculas orgánicas derivadas de extractos de plantas, así como fármacos caducados, por sus potenciales propiedades de inhibición de la corrosión en metales. En general, las moléculas orgánicas que exhiben alto rendimiento tienen características similares. En consecuencia, se han postulado enfoques computacionales basados en el paradigma relación cuantitativa estructura-actividad/propiedad (QSAR/QSPR, por sus siglas en inglés) como alternativas a los enfoques experimentales. QSAR/QSPR tiene como objetivo obtener un modelo matemático útil para predecir la actividad biológica o la propiedad química de una especie en términos de un conjunto de descriptores cuantitativos obtenidos mediante química cuántica [1]. Este estudio presenta una exploración de tres familias distintas de modelos de regresión para predecir la eficiencia de inhibición de la corrosión (IE%) de fármacos comerciales como inhibidores de corrosión orgánicos a través de relaciones QSAR/QSPR.

El análisis abarca un conjunto de datos de 60 fármacos comerciales, uniendo descriptores fisicoquímicos con propiedades obtenidas mediante simulaciones dentro de la teoría del funcional de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) [2]. La eficiencia en la inhibición de la corrosión (IE%) se modeló mediante a) modelos autorregresivos con entradas exógenas (ARX), resueltos mediante el algoritmo de mínimos cuadrados ortogonales de regresión directa (FROLS) y b) mediante el sistema de inteligencia artificial (IA) Watson de IBM. El método ARX-FROLS facilitó la reducción de la dimensionalidad de diez descriptores iniciales a tan solo cinco variables fundamentales, resaltando las propiedades energéticas y electrónicas de los compuestos orgánicos, como son las energías de los orbitales frontera HOMO y LUMO. Además, los métodos de árboles de decisión, implementados la herramienta AutoAI de IBM, resultó ser un modelo altamente preciso y exacto en este estudio. Según las métricas de validación externa, MAPE, MSE y RMSE, los modelos muestran resultados prometedores.

[1] Pearson, R. G. (1988). *Inorganic chemistry*, 27(4), 734-740.

[2] Serrano, A. A., Miralrio, A., & Beltran-Perez, C. (2024). *Models for predicting corrosion inhibition efficiency of common drugs on steel surfaces: A rationalized comparison among methodologies*. *Applied Surface Science Advances*, 22, 100621.

VI.5 Estudio *ab-initio* de absorción de CO₂ en grafeno dopado con defectos, bajo la Teoría de la Funcional de la Densidad.

Juan Oseas López Fuentes¹, Roxana M. del Castillo ¹, J. M. Ramírez de Arellano²

¹ *Facultad de Ciencias–UNAM;* ² *Tecnológico de Monterrey*

En este trabajo se estudia la interacción entre una capa de grafeno dopada con átomos de cobre (Cu) y una molécula de dióxido de carbono (CO₂), mediante cálculos *ab initio* bajo el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Se utilizó el paquete computacional Quantum ESPRESSO, empleando el funcional de correlación e intercambio PBE, junto con la corrección semiempírica de Van der Waals DFT-D3 de Grimme.

Inicialmente realizamos relajaciones estructurales para generar una vacante en la hoja de grafeno. Esto se logró eliminando un átomo de carbono de la sección central de la celda unitaria considerada, la cual contiene un total de 50 átomos de carbono. Se analizó la densidad de estados (PDOS) tanto para el grafeno prístino como para el grafeno con vacancia. Luego se introdujo un átomo de Cu en la vacante y, tras la relajación estructural, se encontró que el átomo es fuertemente adsorbido, con una energía de adsorción de -3.5439 eV, sugiriendo que se trata de un proceso de quimisorción. Además, el análisis de cargas de Löwdin indica una transferencia de carga significativa entre el átomo de Cu y la estructura de grafeno defectuosa.

Finalmente, se estudió la interacción de una molécula de CO₂ con el sistema Cu+grafeno. Usando el funcional PBE sin corrección de Van der Waals, no se observó interacción. Sin embargo, al incorporar la corrección de Van der Waals, se obtuvo una energía de adsorción de -0.1786 eV, indicando una fisorción débil de la molécula de CO₂ sobre la superficie dopada. Los resultados obtenidos son consistentes con estudios previos y sugieren que el sistema de grafeno dopado con Cu podría tener potencial para aplicaciones en sensores de CO₂, dada su capacidad para retener débilmente estas moléculas sin perturbar significativamente su estructura.

VI.6 Modelos asistidos por inteligencia artificial para predecir la actividad de fármacos quimioterapéuticos modificados con el fullereno C₆₀ y sus derivados.

Jonathan Siu Loong Robles Hernández¹

¹ *Tecnológico de Monterrey*

Empleando modelos de relación cuantitativa estructura–actividad (QSAR) y relación cuantitativa estructura–propiedad (QSPR), este estudio explora la aplicación del fullereno C₆₀ y sus derivados como posibles nanoacarreadores para medicamentos de quimioterapia contra el cáncer de mama. Se investigaron fármacos aislados y dos complejos fármaco–C₆₀ y fármaco–carboxifullereno (C₆₀–COOH) tomando como objetivo la proteína CXCR7 para el acoplamiento molecular. La investigación involucró más de treinta fármacos y empleó la teoría ácido–base duro–blando de Pearson y descriptores QSAR/QSPR comunes para construir modelos predictivos de los scores de acoplamiento. Se calcularon descriptores energéticos mediante química cuántica a nivel DFTB3 (*Density Functional–based Tight Binding*). Los resultados indican que los complejos fármaco–fullereno tienen un score mayor con la proteína CXCR7 que los fármacos aislados. Se identificaron sitios específicos de unión, con ubicaciones variables para cada complejo. Los modelos predictivos, desarrollados mediante regresión lineal múltiple e inteligencia artificial (IA) de IBM Watson, lograron errores porcentuales absolutos medios por debajo del 12 %, considerando variables clave identificadas por la IA. Los modelos incluyeron principalmente descriptores cuantitativos recogidos de bases de datos, así como descriptores calculados. Además, se utilizó un fullereno soluble en agua para comparar los resultados obtenidos con DFTB3 con un enfoque convencional de funcional de densidad. Lo anterior busca mejorar la quimioterapia contra el cáncer de mama aprovechando nanoacarreadores basados en fullerenos.

VI.7 Estudio de defectos estructurales en carburo de tungsteno bidimensional para la captura de N₂O.

Mariana Esther Torres Revuelta¹, Luis Fernando Magaña Solís¹

¹ *Instituto de Física–UNAM.*

Los carburos de metales de transición forman parte de la familia de los MXenos, materiales bidimensionales con propiedades electrónicas y mecánicas de creciente interés. En este trabajo se estudia al carburo de tungsteno, material conocido por sus aplicaciones industriales debido a su alta conductividad eléctrica, resistencia a la corrosión y estabilidad térmica en su estructura tridimensional (*bulk*). Sin embargo, se sabe que la reducción dimensional puede modificar significativamente sus propiedades, especialmente en materiales pesados como el tungsteno, los cuales han sido poco explorados mediante cálculos de primeros principios.

Aquí se presenta un estudio estructural y electrónico del carburo de tungsteno con estequiometría 1:1 en su estructura bidimensional, utilizando el software Quantum ESPRESSO, con la teoría del funcional de la densidad (DFT). Se consideraron tres configuraciones: una superficie prístina y dos con defectos de vacancia (carbono y tungsteno), con el fin de analizar la adsorción de óxido nitroso (N₂O). Los resultados muestran una mayor afinidad electrónica del contaminante hacia los sitios de tungsteno, ligeramente menos electronegativo que el carbono. Las energías de adsorción obtenidas fueron de 74.3 mRy (prístina), 527.7 mRy (vacancia de carbono) y 61.1 mRy (vacancia de tungsteno). Se analizaron propiedades electrónicas como la hibridación de orbitales atómicos y se propone, como trabajo futuro, la predicción de las propiedades ópticas del sistema como complemento a esta investigación.

VII.1 From soft tissue to composite design: A multiscale perspective on visco-piezoelectric behavior.

R. Rodríguez-Ramos^{1,2}, Y. Espinosa-Almeyda³, P. Rodríguez-Bermúdez⁴, J. A. Otero⁵

¹*PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Brasil.*

²*Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana.*

³*Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, México.*

⁴*Universidade Federal Fluminense, Brasil.*

⁵*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Edo. de Mex., México.*

This work investigates visco-piezoelectric behavior from a multiscale perspective, establishing a conceptual and methodological link between soft tissue and the design of advanced composite materials. By employing the method of asymptotic homogenization, effective macroscopic coefficients are derived to describe the behavior of heterogeneous visco-piezoelectric media based on their microscale properties. This approach enables a more accurate characterization of the coupled mechanical, electrical, and viscoelastic effects present in complex structures such as brain tissue.

The primary motivation is to better understand how biological microstructures particularly those in the skin, brain, respond to mechanical and/or electrical stimuli over physiologically relevant timescales. The resulting multiscale models provide a foundation for predictive tools applicable to both biomechanics and the design of smart materials inspired by biological systems.

VII.2 Propiedades efectivas de compósitos bifásicos micropolares reforzados con fibras cilíndricas

Y. Espinosa-Almeyda^{1,*}, R. Rodríguez-Ramos^{2,3}, J. A. Otero⁴, H. Camacho-Montes¹

¹*Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Av. Del Charro 450 Norte Cd. Juárez, Chihuahua, CP 32310, México.*

²*Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba.*

³*PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecília, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.*

⁴*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. de México, México.*

En el presente trabajo se desarrolla el método de homogeneización asintótica de dos escalas (MHA) para la determinación de las propiedades efectivas de compósitos elásticos micropolares bifásicos con microestructura periódica, reforzados mediante fibras cilíndricas unidireccionales. En este marco, el problema estático de la elasticidad micropolar se formula mediante un sistema de ecuaciones diferenciales parciales, sujeto a condiciones de contorno uniformes y de contacto perfecto en las interfaces entre las fases constituyentes. La microestructura periódica considerada es caracterizada por fibras cilíndricas unidireccionales e infinitamente largas embebidas en una matriz homogénea; cuyos materiales constituyentes son centrosimétricos e isótropos. Como consecuencia de la implementación del MHA, se establece el planteamiento matemático de los problemas locales, así como la formulación analítica explícita de los coeficientes efectivos. En particular, las propiedades efectivas de compósitos elásticos micropolares fibrosos se derivan. Finalmente, se presentan algunos resultados numéricos representativos donde se analiza el efecto en el comportamiento efectivo de la distribución de la fibras en la matriz. A su vez, se evalúa la precisión del modelo desarrollado mediante comparaciones con soluciones obtenidas por el método semi-analítico de los elementos finitos (SAFEM).

Palabras Claves: método de homogeneización asintótica, compósitos elásticos micropolares fibrosos, SAFEM

Correo electrónico del autor de correspondencia:

Yoanh Espinosa-Almeyda, yoanhealmeyda1209@gmail.com

VII.3 Método de homogeneización asintótica aplicada a medios porosos laminados.

Panters Rodríguez-Bermúdez¹, R. Rodríguez-Ramos¹⁻², E. Torres-Figueiras², Y. Espinosa-Almeyda³, J.A. Otero⁴, J. Merodio⁵, J. A. R. Durán¹, Raimondo Penta⁶

¹PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense (UFF), Brasil.

²Universidad de La Habana, Cuba.

³Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, México.

⁴Escuela de Ingeniería y Ciencia, Tecnológico de Monterrey, México.

⁵Technical University of Madrid, School of Informatics Systems Engineering, Madrid, Spain.

⁶School of Mathematics and Statistics, University of Glasgow, Glasgow, UK.

El presente trabajo forma parte de un estudio en curso, en el que se aplica el Método de Homogeneización Asintótica para calcular las propiedades efectivas de un medio continuo compuesto por un medio poroso heterogéneo (posiblemente laminado) y un fluido cuya velocidad de infiltración en los poros obedece a la ley de Darcy. Los cálculos se realizan de manera general para el caso tridimensional, resolviendo los problemas locales con determinadas condiciones de interfase entre los materiales. Se obtiene una fórmula para la conductividad hidráulica efectiva del medio poroso, así como valores efectivos para la velocidad del fluido. A modo de ejemplo, se presentan los resultados correspondientes a los casos simplificados unidimensional y tridimensional laminado. Para este último, se asume que el material es ortotrópico, de forma tal que el tensor de permeabilidad es diagonal.

VII.4 Propiedades efectivas termodinámicas. ¿Existe una conductividad térmica efectiva para el caso transiente?

José A. Otero¹, Ernesto Hernández Cooper¹, Reinaldo Rodríguez-Ramos^{2,3}.

¹*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. de México, México.*

²*Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba.*

³*PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecília, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.*

Se implementa un método semi-analítico de elementos finitos basado en la combinación del método de homogeneización asintótica a dos escalas (AHM) y el método de elementos finitos (FEM) para resolver la ecuación de conducción de calor heterogénea-estacionaria. Se obtiene la conductividad térmica efectiva en un compuesto 3D. El compuesto 3D está formado por una matriz que contiene dos cascarones esféricos concéntricos y una esfera en el centro (compuesto de 4 fases). Se presenta la conductividad efectiva obtenida para un compuesto laminado usando el método de homogeneización asintótica para el caso estacionario. ¿Se puede llegar al resultado anterior sin usar ninguna técnica clásica conocida de homogeneización? Solución para un sistema formado por dos láminas A/B. Solución para un sistema formado por cuatro láminas A/B/A/B. ¿La conductividad efectiva del problema estacionario es igual para el caso transiente? ¿Es posible llegar a obtener la conductividad térmica efectiva en función del tiempo para el estado transiente?

VII.5 Deep Learning for Hemodynamics in Aortic Aneurysms.

O.L. Cruz-González¹, V. Deplanoa², B. Ghattas².

¹*Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, IRPHE UMR 7342, Marseille, France.*

²*Aix Marseille Univ, CNRS, AMSE UMR 7316, Marseille, France.*

Due to the limited accuracy of 4D Magnetic Resonance Imaging (MRI) in identifying hemodynamics in cardiovascular diseases, the challenges in obtaining patient-specific flow boundary conditions, and the computationally demanding and time-consuming nature of Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations, it is crucial to explore new data assimilation algorithms that offer possible alternatives to these limitations. In the present work, we study Physics-Informed Neural Networks (PINNs), Deep Operator Networks (DeepONets), and their Physics-Informed extensions (PI-DeepONets) in predicting vascular flow simulations in the context of a 3D Abdominal Aortic Aneurysm (AAA) idealized model. PINN is a technique that combines deep neural networks with the fundamental principles of physics, incorporating the physics laws, which are given as partial differential equations, directly into loss functions used during the training process. On the other hand, DeepONet is designed to learn nonlinear operators from data and is particularly useful in studying parametric partial differential equations (PDEs), e.g., families of PDEs with different source terms, boundary conditions, or initial conditions. Here, we adapt the approaches to address the particular use case of AAA by integrating the 3D Navier-Stokes equations (NSE) as the physical laws governing fluid dynamics. In addition, we follow best practices to enhance the capabilities of the models by effectively capturing the underlying physics of the problem under study. The advantages and limitations of each approach are highlighted through a series of relevant application cases. We validate our results by comparing them with CFD simulations for benchmark datasets, demonstrating good agreements and emphasizing those cases where improvements in computational efficiency are observed. The proposed methodology serves as a starting point for future research in the application of Deep Learning in cardiovascular disease modeling and offers a promising alternative for real-time simulation and monitoring of vascular flow in clinical settings.

VII.6 Fractional formulation for some relevant equations of mathematical physics.

Fernando Olivar Romero¹

¹*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México.*

We present analytical results for a class of fractional partial differential equations that extend classical models such as the heat, wave, Klein–Gordon, and telegraphist’s equations. By introducing Caputo and Riesz fractional operators, these equations capture complex behaviors involving dissipation, memory, and spatial non-locality. Solutions are derived using Laplace and Fourier transforms and expressed in terms of H-Fox functions. To illustrate the dynamics modeled by these equations, we show graphical simulations that reveal how disturbances evolve over time in vibrating media and lossy transmission lines.

VII.7 Introducción a “Physics-Informed. Neural Networks PINN”

José Luis Gómez Muñoz¹

¹*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México.*

Las “Physics-Informed Neural Networks PINN”, redes neuronales informadas con Física, se pueden describir como métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales, que comparten mucha de los fundamentos y técnicas con otros métodos; por ejemplo los puntos de colocación se convierte en el conjunto de entrenamiento de la red neuronal, mientras que minimizar el residuo se convierte en la regularización de la función de costo. Entonces, ¿Porqué aprender y usar PINN en lugar de los métodos numéricos tradicionales? Quizás la ventaja principal es aprovechar la enorme cantidad y poder de las librerías que se han desarrollado y se está creando para redes neuronales, en diferentes lenguajes de programación y también en hardware especializado. Ya hay gran cantidad de publicaciones sobre el uso de PINNs en ciencia de materiales, dinámica de fluidos, epidemiología, entre otros. Y una ventaja en el campo de la educación, es que permite a quien ya tiene familiaridad con ecuaciones diferenciales entender cómo funciona por dentro una red neuronal, y viceversa, puede ser una forma de que alguien con conocimiento de aprendizaje automático (machine learning) aprenda acerca de la modelación con ecuaciones diferenciales en Física y otras disciplinas.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VII.8 Extremos con multiplicadores únicos en problemas de control óptimo.

Jorge Antonio Becerril Gómez

¹Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México.

En esta plática se discutirá la importancia de la unicidad de los multiplicadores en el Principio del Máximo de Pontryagin en problemas de control óptimo, y algunas condiciones recientes que garantizan esta unicidad junto con ejemplos sencillos de su aplicación.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VII.9 Correcciones a la línea de saturación líquido-sólido en equilibrio termodinámico para aplicaciones en almacenamiento de energía térmica.

Ernesto M. Hernández-Cooper¹ y José A. Otero-Hernández¹

¹*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México.*

La curva de saturación para sustancias puras y en equilibrio termodinámico ha sido obtenida mediante una expansión a segundo orden de la energía libre de Gibbs. Partiendo de la relación de Gibbs-Duhem para la energía libre, es posible realizar una expansión de la energía libre en la fase sólida y en la fase líquida alrededor de una presión y temperatura de saturación conocidas. El objetivo de esto es predecir la temperatura de saturación y la entalpía de formación de cualquier punto sobre la curva de saturación a partir de propiedades termodinámicas conocidas en un punto sobre la línea de saturación. Recientemente, se ha propuesto una forma diferente de obtener las ecuaciones de saturación en el equilibrio, aplicando la primera y segunda ley de la termodinámica a trayectorias isobáricas-isotérmicas que conectan dos puntos de saturación distintos. Las diferencias entre ambos enfoques pueden ser explicadas por la discontinuidad cerca de la saturación en este tipo de transiciones de fase de primer orden. Adicionalmente, se propondrán otras ecuaciones de saturación en el equilibrio y que son resultado del orden en que se aplican los procesos isobárico-isotérmico para conectar dos puntos de saturación desde la fase líquida y la fase sólida. Se discutirá la diferencia que resulta de este último análisis en las ecuaciones de saturación tanto para sustancias con curvas de pendiente positiva o negativa. Se concluye con una idea de aplicar este enfoque, al estudio de las curvas de saturación fuera del equilibrio termodinámico, pero ahora sustituyendo el proceso isotérmico por un proceso adiabático al conectar dos puntos sobre la curva de saturación.

VII.10 *Densidades de energía en materiales de cambio de fase encapsulados a alta temperatura.*

Rubén D. Santiago-Acosta¹, José A. Otero Hernández¹, Rolando Pérez-Álvarez² y Ernesto M. Hernández Cooper¹

¹*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México*

²Universidad Autónoma del Estado de Morelos UAEM.

Este trabajo representa un intento para entender parte de la termodinámica asociada con el almacenamiento de energía en materiales de cambio de fase (MCF) confinados. Las propiedades de cambio de fase son estimadas mediante trayectorias termodinámicas que conectan dos puntos a lo largo de la curva de saturación líquido-sólido. El análisis resulta en algunas diferencias conceptuales entre el calor latente obtenido por otros autores y el estimado en este trabajo. Además, encontramos que las propiedades elásticas de los sistemas núcleo-cascarón están acopladas con las propiedades de saturación estimadas. Un conjunto de ecuaciones generales para obtener las densidades de energía volumétrica y gravimétrica en medios compresibles son introducidas en este trabajo. Las ecuaciones resultantes para las densidades de energía incorporan la compresibilidad isotérmica de la fase líquida y la sólida. El conjunto de ecuaciones propuestas representa una estimación más realista de la capacidad de almacenamiento en sistemas confinados que las estimaciones obtenidas de modelos previos donde no se toma en cuenta la compresibilidad de las fases. Por lo tanto, en esta propuesta es posible introducir el límite altamente compresible (LAC), el cual representa un comportamiento ideal donde los MCF tienen una capacidad máxima de almacenamiento de energía. El desempeño térmico de los MCFs confinados puede ser mejorado mediante una comparación entre la energía almacenada por materiales de compresibilidad finita y su comportamiento cerca del LAC. La eficiencia de almacenamiento de energía de una configuración particular de MCF confinado es definida como la relación entre la densidad de energía del material y su LAC. Finalmente, esta eficiencia es utilizada para evaluar el desempeño de cada combinación y para elaborar un criterio de selección de materiales o combinaciones núcleo-cascarón. Resultados experimentales son utilizados para validar el LAC introducido en este trabajo.

VII.11 Supersimetría y operadores de escalera de primer y segundo orden en sistemas con masa dependiente de la posición.

Mario Iván Estrada¹

*¹Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe
Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México.*

Los sistemas con masa dependiente de la posición pueden describirse mediante una clase de operadores que incluye los Hamiltonianos de BenDaniel-Duke. Los enfoques tradicionales para abordar estos problemas son, en su mayoría, numéricos o intentan establecer una relación con sistemas de masa constante. En este trabajo, se impone la existencia de operadores escalera de primer orden y segundo orden como condición inicial para definir el sistema. Posteriormente, se aplican transformaciones supersimétricas, lo que permite generar familias de Hamiltonianos cuyo espectro puede obtenerse de manera analítica, dado un perfil de masa específico.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VII.12 Generación de socios supersimétricos con potenciales complejos y espectro real.

Zurika Iveth Blanco Garcia¹

*¹Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe
Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México.*

Se analizan transformaciones supersimétricas aplicadas a sistemas cuánticos exactamente solubles con potencial real, mediante operadores de entrelazamiento operatorial complejos. A través de una transformación de Darboux, se generan sistemas con potencial complejo, pero con espectro de energía real. La construcción se apoya en la relación entre las ecuaciones no lineales de Riccati y Ermakov, lo cual permite caracterizar y obtener el espectro del sistema transformado. Este enfoque ofrece un marco sistemático para explorar sistemas no hermíticos.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VII.13 Efecto abanico y amplificación de un haz de luz en un medio fotorrefractivo

Miguel Angel Arvizu Coyotzi¹

*¹Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. Al Lago de Guadalupe
Km. 3.5, CP 52926, Edo. De México, México.*

El óxido de bismuto y silicio (BSO) es un material fotorrefractivo, este tipo de materiales modifican su índice de refracción cuando luz intensa incide sobre ellos, entre las aplicaciones de dicho fenómeno se encuentran la holografía y el almacenamiento óptico. Se presenta un modelo bidimensional, basado en la solución de las ecuaciones de materiales no lineales en el estado estacionario. Con dicho modelo es posible recrear con cierto éxito el efecto abanico y la amplificación óptica.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VIII.1 Recubrimientos autolimpiantes de óxidos metálicos para aplicaciones en celdas solares

Oscar Andrés Jaramillo-Quintero

Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos, México

El desarrollo de películas autolimpiantes está llamando la atención de investigadores y científicos dadas las posibilidades de ser empleados en edificaciones y dispositivos expuestos a condiciones medioambientales extremas, reduciendo el costo de limpieza constante para no afectar su correcto funcionamiento. En la presente charla, se presentarán los resultados de la investigación de las propiedades autolimpiantes de películas de óxido de antimonio depositadas sobre vidrios para aplicaciones en celdas solares. Estas películas exhibieron un ángulo de contacto mayor de 90° y una brecha de banda prohibida de 3.6 eV. En estudios de autolimpieza, las celdas solares con los recubrimientos demostraron una pérdida menor en la conversión de eficiencia de energía comparadas con aquellas celdas sin recubrimiento.

Palabras claves: autolimpieza, recubrimientos, películas delgadas, celdas solares.

Agradecimientos: Al estudiante de doctorado Moisés Laguna Estrada y a los técnicos de IER UNAM: Gildardo Casarrubias Segura, María Luisa Ramón y Rogelio Morán.

VIII.2 Simulación de celdas solares: una herramienta de apoyo a la experimentación

Fernando Ayala Mató

Instituto de Energías Renovables – UNAM.

La simulación numérica se ha consolidado como una herramienta indispensable para el desarrollo de tecnologías fotovoltaicas, permitiendo comprender, predecir y optimizar el comportamiento de dispositivos solares antes de su implementación experimental. En esta ponencia se presenta una metodología para realizar simulaciones realistas de celdas solares basada en el uso del software SCAPS 1-D, una herramienta ampliamente utilizada en la comunidad científica. Se destaca la utilidad del análisis paramétrico para identificar los mecanismos de pérdida dominantes y proponer rutas de optimización tecnológica. Finalmente se aborda un caso de estudio concreto: una celda solar con estructura $\text{SnO}_2:\text{F}/\text{CdS}/\text{Sb}_2(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_3/\text{Spiro-OMeTAD}/\text{Au}$, cuya eficiencia del 10% fue reproducida mediante simulación al incorporar mecanismos de recombinación radiativa, no radiativa e interfaciales.

Palabras clave: SCAPS 1-D, simulación numérica, celdas solares, antimonio sulfoseleniuro, mecanismos de pérdida, modelado de dispositivos, eficiencia fotovoltaica.

VIII.3 Environmentally Friendly Development of Ag–Sb Chalcogenide Materials for Photodetection

M.V. Morales Gallardo¹, E. Regalado Pérez¹, X. Mathew¹, N.R Mathews^{1*}

Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos, 62580, México

*nrm@ier.unam.mx

The search for sustainable semiconductor materials for optoelectronic applications has led to the development of Ag-Sb-S, a compound with strong optical sensitivity in the visible spectrum, making it a promising candidate for photodetector applications. In this study, AgSbS₂ nanoparticles (NPs) were synthesized via solvothermal method using ethanol as a non-toxic solvent. Structural characterization through X-ray diffraction confirmed the formation of a pure crystalline phase with a cubic structure and an average crystallite size of approximately 37 nm. Raman spectroscopy revealed characteristic vibrational modes at 189, 250, and 448 cm⁻¹, consistent with AgSbS₂ bonding environment. The material exhibited suitable optical properties, including a direct band gap of 1.54 eV. The resulting AgSbS₂ thin films demonstrated a photosensitivity of 700%. In terms of device performance, AgSbS₂-based photodetectors achieved a responsivity of ~52 A/W and a detectivity of 5×10^{12} Jones. These findings highlight AgSbS₂ as a strong candidate for high-performance optoelectronic devices, offering key advantages such as low-cost processing, environmentally friendly synthesis methods, and excellent sensitivity to visible light.

Keywords: AgSbS₂, Photodetectors, Photosensitivity, Detectivity.

Acknowledgments: This work is part of the project PAPIIT IN111824, and has collaboration with the project PAPIIT-IN109324 in collecting and analyzing the Raman data. M.V.M.G acknowledges the postdoctoral fellowship (706239) from CONAHCyT. Authors thank Dr. Eneú Barrios for assistance with band gap measurements, Dr. José Campos for support with electrical measurements and Mtra. María Luisa Ramón García and Dr. Patricia Altuzar Coello for supporting with XRD measurements.

VIII.4 Chemical synthesis and characterization of bismuth chalcogenide-based thin films for optoelectronic applications

Itzayana Segundo Suarez¹, M.V Morales Gallardo, A. Cerdán-Pasarán², X. Mathew¹, N.R Mathews^{1*}

¹ *Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México; Temixco, Morelos, 62580, México.*

² *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León C.P. 66455, México*

*nrm@ier.unam.mx

Chalcogenide semiconductors have gained significant attention for a wide range of applications owing to their outstanding optoelectronic properties. These materials possess high optical absorption coefficients and can be developed through economical and scalable methods, which makes them excellent candidates for use in photovoltaic cells, photodetectors, and thermoelectric devices. In this work, Bi₂S₃ thin films were synthesized by spin-coating technique from a solution with bismuth nitrate and thiourea as precursors. Two different solvents were tested: 2-methoxyethanol and N-N dimethylformamide (DMF). The thin films were deposited on glass substrates and annealed at 250 °C for 30 min. The thickness of the films deposited using both solvents were in the range ~ 300 nm. The XRD results showed the formation of crystalline Bi₂S₃ with orthorhombic phase (PDF #17-0320), as indicated by the (310), (220) and (211) planes. Raman spectroscopy showed peaks at 188 cm⁻¹ and 237 cm⁻¹ that were attributed to the transverse stretching vibrations (Ag) of the Bi-S bonds. The band gap calculated was 1.52 eV for the sample with 2-methoxyethanol, while for the sample with DMF was 1.59 eV. The DMF-processed sample exhibited an electrical conductivity of 5.98 ×10⁻⁵ (Ω·cm)⁻¹ and a photosensitivity of 432. In contrast, the sample processed with 2-methoxyethanol demonstrated a significantly higher conductivity of 4.54×10⁻⁴ (Ω·cm)⁻¹ but a substantially lower photosensitivity of 118.

Acknowledgments: This work is part of the project PAPIIT IN111824, and has collaboration with the project PAPIIT-IN109324 in collecting and analyzing the Raman data. Authors thank Enue Barrios for assistance with band gap measurements, José Campos for support with electrical measurements, Maria Luisa Ramón García and Patricia Altuzar Coello for supporting with XRD measurements, and Gildardo Casarrubias Segura for general help in laboratory.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VIII.5 Estudio óptico y estructural de películas delgadas de CdSe tratadas térmicamente con CdCl₂, MgCl₂ y mufla para su posterior aplicación en celdas solares

Cesar Hernández Vasquez¹, Guillermo Leonardo Vidal Martínez³, José Manuel Flores Marquez², Miguel Ángel González Trujillo¹, María de Lourdes Albor Aguilera³

¹*Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Depto. De Formación Básica, UPALM Zacatenco, 07738, CDMX, México*

²*Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. de Ing. en Metalurgia y Materiales, 07738, UPALM Zacatenco, CDMX, México*

³*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México*

Correo electrónico: chernandezva@ipn.mx

En el desarrollo de celdas solares, las películas delgadas son ampliamente estudiadas ya que es de suma importancia encontrar materiales con propiedades físicas óptimas, tales como una banda directa, alta capacidad de absorción que permitan una eficiente conversión de la luz solar en energía eléctrica. Las celdas solares de CdTe han sido ampliamente estudiadas sin embargo se siguen estudiando debido a la aparición de nuevos materiales o bien la incursión de otros que ayuden a la conversión. Tal es el caso de las películas delgadas de CdSe que han sido exploradas como capas activas debido a su alta movilidad de carga y estabilidad química. Sin embargo, su desempeño puede mejorarse mediante tratamientos térmicos y químicos, que pueden optimizan su cristalinidad y reducir defectos estructurales. En este trabajo, se evaluó el efecto de distintos tratamientos térmicos con CdCl₂ y MgCl₂, así como el uso de una mufla, sobre la morfología, estructura y propiedades ópticas de las películas. Las películas fueron depositadas mediante la técnica de transporte en fase de vapor cerrada (CSVT) y caracterizadas ópticamente mediante espectroscopía UV-Vis y estructuralmente mediante difracción de rayos X (DR-X). Los resultados obtenidos muestran cambios significativos en la cristalinidad, composición superficial y eficiencia óptica de las películas, lo que sugiere posibles mejoras en su desempeño para aplicaciones en celdas solares.

Agradecimientos: CHV agradece el apoyo de los proyectos SIP 20253946, 20251077, 20253798 y 20253799 del IPN, CHV y JMFM agradecen a SECIHTI-México.

VIII.6 Depósito por Baño Químico Termostático de CdS dopado con Ag: Estudio comparativo de propiedades ópticas y estructurales

JM Flores-Márquez¹, A.R. Andrade-Plata², C. Hernández-Vásquez³, M.A. González Trujillo³, M.L. Albor-Aguilera⁴

¹*Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. de Ing. en Metalurgia y Materiales, 07738, UPALM Zacatenco, CDMX, México.*

²*Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. de Ing. Química Industrial, 07738, UPALM Zacatenco, CDMX, México.*

³*Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Depto. De Formación Básica, UPALM Zacatenco, 07738, CDMX, México.*

⁴*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.*

Correo electrónico: *jfloresm@ipn.mx (JM Flores-Márquez)*

La tecnología asociada con la energía obtenida por el Sol es ampliamente estudiada, tal es el caso de las celdas solares de segunda generación que pueden ser optimizadas a través de la incursión de diferentes materiales semiconductores tipo n y tipo p que constituyen un dispositivo fotovoltaico. En particular la optimización del material tipo n (comúnmente conocido como material ventana) es de suma importancia. Así se busca mejorar las características optoelectrónicas de las películas delgadas de CdS a través de diferentes métodos, tales como los procesos de dopaje in situ. En el presente trabajo se pretende la introducción de iones de Ag por medio de un proceso de dopaje in situ empleando un medio adecuado como lo es el depósito por baño químico termostático (DBQ) sobre un sustrato FTO ($\text{SnO}_2:\text{F}$) a 75°C con diferentes tiempos de depósito. El depósito in situ del CdS por DBQ utiliza CdCl_2 (0.1 M) y $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ (0.3 M) como soluciones precursoras, NH_4Cl (0.2 M) y NH_4OH (2 M) son usados para la promover agentes complejos, AgNO_3 se usa como fuente de Ag. Se realizaron mediciones de transmitancia por espectroscopia UV-Vis a muestras de CdS dopadas con diferentes concentraciones de Ag y número de agregados para analizar los cambios del material ventana ocasionados por el dopaje, obteniendo un incremento en el valor promedio de la transmitancia, así como un incrementando en el valor de brecha de energía prohibida antes y después del tratamiento térmico en mufla respecto de la referencia, resultados favorables en las características del CdS, adicionalmente se analizaron las muestras obtenidas por GI-XRD a 0.2° para comparar sus propiedades estructurales.

Palabras clave: CdS:Ag, DBQ termostático, celdas solares de CdTe.

Agradecimientos: JMFm agradece el apoyo de los proyectos SIP 20251077, 20253946, 20253798 y 20253799 del IPN, JMFm y CHV agradecen a SECIHTI-México.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

VIII.7 Revalorización del bagazo de malta cervecera para la producción de bioetanol

C. Rosas-Gómez, J.Y. Blancas-Martínez, M.A. Acosta-Mijangos, O. Gutiérrez-Barbosa, G. Poblete-Martínez, C.E. Santolalla-Vargas, J. Martínez-Limón

Departamento de Biociencias e Ingeniería, Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios sobre Medio Ambiente y Desarrollo (CIEMAD), Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, 07340, MÉXICO

Correo electrónico: crosasg1701@alumno.ipn.mx

La revalorización de los residuos de la industria cervecera representa un proceso fundamental para el aprovechamiento del almidón presente en la malta residual para producir un biocombustible de segunda generación, como lo es el bioetanol. En el presente proyecto se analiza la viabilidad del uso de dos tipos de hidrólisis, ácida e hidrólisis enzimática, para la obtención de azúcares fermentables a partir de dicha malta.

La biomasa utilizada fue obtenida de diferentes tipos de cerveza, tanto claras como oscuras, empleando distintas relaciones sólido – líquido (1:6, 1:4, 1:3 y 1:2). El bagazo fue almacenado en cubetas sanitizadas para evitar su contaminación. Asimismo, se utilizaron parrillas, termómetros y vasos de precipitado para las pruebas a nivel laboratorio, así como tanques de 60 L y hornillas para las pruebas a nivel planta piloto. Para la medición de densidad se empleó un refractómetro. En cuanto a reactivos, se utilizó H_2SO_4 para la hidrólisis ácida, $NaHCO_3$ para neutralización del ácido. Para la hidrólisis enzimática se emplearon amiloglucosidasas de White Labs y un complejo enzimático llamado Brutzyme de Cellar Science que contiene amiloglucosidasa, α -amilasa y pululanasa.

Para la hidrólisis ácida, se realizaron ensayos con ácido cítrico y ácido sulfúrico, tomando como referencia el estudio realizado por Aguilera & Canizales (2004) [1], determinando que este último proporciona una mayor cantidad de azúcares. Asimismo, se realizaron pruebas para establecer las condiciones óptimas de concentración, pH y temperatura a nivel laboratorio y planta piloto.

En la hidrólisis enzimática, se realizaron pruebas utilizando amiloglucosidasa mediante la simulación de una maceración a nivel laboratorio. Además, se evaluó un complejo enzimático con el fin de determinar si su uso mejora la eficiencia del proceso.

Por otro lado, se realizaron ensayos combinando ambos métodos, estos comenzaron con una hidrólisis ácida durante 90 min. En los casos en que el pH resultó demasiado bajo para continuar con la hidrólisis enzimática, se ajustó con $NaHCO_3$ y se añadieron de 1 a 2 kg de malta nueva y 4 mL de complejo enzimático de Cellar Science por cada 159 L de medio.

Comparando ambos métodos e interpretando los resultados de estos, incluida la combinación de procesos, se concluyó que la opción más viable considerando eficiencia y el impacto al medio ambiente, fue la hidrólisis enzimática utilizando amiloglucosidasa, con una relación 1:2, pH de 5.5 y temperatura de 55°C durante 2 horas. Esto permitió obtener una mayor concentración de azúcares fermentables que son consumidas por *Saccharomyces cerevisiae* durante la fermentación alcohólica, para posteriormente destilar el fermentado y obtener el bioetanol de interés.

Agradecimientos: El CIEMAD-Instituto Politécnico Nacional agradece el apoyo otorgado mediante los proyectos SIP-IPN 20250083 y SIP-IPN 20250291.

[1] Aguilera-Rivera, N., & Canizales-Leal, M.J., Cinética de la hidrólisis ácida de la cascarilla de cebada, Revista mexicana de ingeniería química, **Vol. 3**, Núm. 3. (2004).

VIII.8 Análisis térmico de un calentador solar de aire con diferente geometría de la placa absorbidora utilizando CFD

René Rodríguez Rivera¹, Ignacio Carvajal Mariscal¹, Hilario Terres Peña²

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME – UPALM, CDMX, 07738, México,

²Universidad Autónoma Metropolitana, Azcapotzalco, Av. San Pablo No 420,
Col. Nueva el Rosario, Alcaldía Azcapotzalco, CP. 02128, CDMX.

Correo electrónico: rivera_0710@hotmail.com

En este trabajo se utilizó la dinámica de fluidos computacional para estudiar el comportamiento térmico de un calentador solar de aire. Se realizó el modelo 3D del calentador y se estudió el impacto que tiene la forma geométrica de la placa absorbidora en el desempeño térmico del calentador. Se estudiaron tres casos de placa; el caso 1 fue la geometría más común, una placa plana, en el caso 2 se utilizó una placa corrugada con sección en forma de triángulo equilátero y en el tercer caso una placa con sección de cuadrado. Los calentadores tuvieron dimensiones de 50cmX80cmX20cm, cada modelo estuvo constituido por un marco de madera, una base de aislante, la placa absorbidora y una cubierta de vidrio. En cada caso se realizó una simulación por medio de elementos finitos en estado estacionario para obtener la distribución de temperaturas y de velocidades, que definen la operación térmica de los calentadores. Para comparar los tres casos se realizaron simulaciones con idénticas condiciones de operación, las cuales fueron radiación solar de 818W/m² y la temperatura ambiente de 29°C, valores típicos correspondientes a la Ciudad de México en el mes de mayo. Como resultado se obtuvo que con el calentador del caso 2, absorbedor con perfil triangular se obtuvo la mejor operación térmica pues se logró elevar la temperatura del aire de 29°C hasta 46.1°C. También, con este calentador se obtuvieron las velocidades más altas en el aire, de hasta 22cm/s entre la placa absorbidora y la cubierta de vidrio.

[1] TIWARI, Gopal Nath. *Solar energy: fundamentals, design, modelling and applications*. Alpha Science Int'l Ltd., 2002.

[2] Addini, M. M., & Nassab, S. G. (2024). Utilization of vortex flow pattern in the design of an efficient solar air heater. *Solar Energy*, 276, 112683

[3] Raj, A. K., Srinivas, M., & Jayaraj, S. (2020). Transient CFD analysis of macro-encapsulated latent heat thermal energy storage containers incorporated within solar air heater. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 156, 119896.

[4] Alnakeeb, M. A., Hassan, M. A., & Teamah, M. A. (2024). Thermal performance analysis of corrugated plate solar air heater integrated with vortex generator. *Alexandria Engineering Journal*, 97, 241-255.

[5] Sharma, M., Atheaya, D., & Kumar, A. (2024). Optimizing hybrid household indirect solar dryer with sinusoidal corrugated Collector: CFD simulations and thermal performance analysis. *Solar Energy*, 279, 112817

[6] Yadav, A. S., Shrivastava, V., Sharma, A., & Dwivedi, M. K. (2021). Numerical simulation and CFD-based correlations for artificially roughened solar air heater. *Materials Today: Proceedings*, 47, 2685-2693.

[7] Kumar, R., Goel, V., & Kumar, A. (2018). Investigation of heat transfer augmentation and friction factor in triangular duct solar air heater due to forward facing chamfered rectangular ribs: A CFD based analysis. *Renewable Energy*, 115, 824-835.

[8] Edwin, M., Eniyan, M. C., & Percy, A. J. (2023). Spiral tube solar water heating computational analysis with concrete absorber: A CFD approach. *Materials Today: Proceedings*.

[9] Salhi, M., Chaatouf, D., Raillani, B., Bria, A., Amraoui, S., & Mezhah, A. (2024). Thermal and dynamic improvement of a double pass solar air heater for drying applications. *Thermal Science and Engineering Progress*, 50, 102583.

VIII.9 Optimización de capas HTL de PEDOT:PSS sobre CdTe mediante spin-coating y su impacto en la eficiencia de conversión fotovoltaica en celdas solares

Jesús Edel EstradaVega^{1*}, María de Lourdes Albor Aguilera^{1**}, Daniel Ramírez Rosales¹, Cesar Hernández Vasquez², José Manuel Flores Marquez³, Jesús Adán Fierro López¹

¹Instituto Politécnico Nacional – ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., Zacatenco, CDMX, 07738, México.

²Instituto Politécnico Nacional – ESCOM, Ciencia Básica, U.P.A.L.M., Zacatenco, CDMX, 07738, México.

³Instituto Politécnico Nacional – ESIQIE, Depto. de Metalurgia, U.P.A.L.M., Zacatenco, CDMX, 07738, México.

E-mail: edelzel@proton.me* ; mlalbor@ipn.mx**

La implementación de capas delgadas de PEDOT:PSS (poli(3,4-etilendioxitiofeno):poli(estirenosulfonato)) como capas transportadoras de huecos (HTL) en celdas solares de telururo de cadmio (CdTe) representa una estrategia atractiva para mejorar la eficiencia y simplificar el procesamiento de dispositivos fotovoltaicos. En este trabajo se presenta el estudio del depósito de PEDOT:PSS sobre películas de CdTe mediante la técnica de spin-coating, con énfasis en el control del espesor y la uniformidad de la película. Se analiza cómo parámetros del proceso (la velocidad de rotación, el volumen depositado y la viscosidad de la solución) influyen en la formación de películas delgadas con espesores adecuados para favorecer el transporte eficiente de huecos. Diversos estudios previos han demostrado que espesores entre 30 y 60 nm son adecuados para equilibrar la conductividad y la transparencia óptica en capas de PEDOT:PSS [1]. La elección de PEDOT:PSS como HTL se basa en su alta conductividad ajustable, buena alineación de niveles de energía con CdTe y facilidad de procesamiento en solución, lo cual ha sido ampliamente respaldado en la literatura [2, 3]. Además, se ha reportado que el uso de esta capa intermedia puede contribuir a una mejor extracción de huecos y una reducción en la recombinación en la interfaz, lo que se refleja en aumentos de eficiencia superiores al 13–15 % en dispositivos optimizados [4]. En conjunto, este trabajo contribuye al desarrollo de arquitecturas fotovoltaicas más eficientes y procesables mediante el uso de polímeros conductores como interfases funcionales entre el semiconductor absorbente y los contactos posteriores. Así mismo, en este trabajo se muestra el impacto de estas películas delgadas sobre el rendimiento de dispositivos fotovoltaicos de CdTe. Los resultados obtenidos de las curvas I–V de los dispositivos con y sin PEDOT:PSS, demuestran que la capa HTL mejora la eficiencia de conversión fotovoltaica de las celdas solares de CdTe.

Palabras clave: CdTe, PEDOT:PSS, celdas solares

Agradecimientos: Proyecto SIP 20251077.

[1] Khan, S., et al. (2020). *Engineering the Work Function and Surface Morphology of PEDOT:PSS Films for Efficient Hole Transport in CdTe Solar Cells*. **ACS Applied Energy Materials**, 3(6), 5941–5948.

[2] del Caño, T., et al. (2019). *PEDOT:PSS as efficient hole transport layer in CdTe thin film solar cells: Performance and stability*. **Organic Electronics**, 70, 130–137.

[3] Yin, X., et al. (2021). *Conductive Polymer Interlayers for Enhanced Charge Transport in CdTe Solar Cells*. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, 234, 111418.

[4] Liang, S., et al. (2022). *Improved Hole Transport Layers for CdTe Solar Cells Using PEDOT:PSS and Conductive Polymer Blends*. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, 240, 111717.

VIII.10 Evaluación Catalítica en la Hidrodesoxigenación de Fenol con Catalizadores NiMo Soportados en Sílices Mesoporosas

Jessica Katherine Lamus Sanguino¹, Carlos Eduardo Santolalla Vargas², Fernando Trejo Zárraga¹

¹*Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional. CP 11200, Ciudad de México, México*

²*Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios Sobre Medio Ambiente y Desarrollo del Instituto Politécnico Nacional. CP 07340, Ciudad de México, México*

Correo electrónico: jlamuss2200@alumno.ipn.mx

Se sintetizaron las sílices mesoporosas conocidas como SBA-15 a partir del pluronic 123, cloruro de hidrogeno y el tetraetil ortosilicato como fuente de sílice. Posteriormente el soporte fue impregnado por la técnica de mojado incipiente con níquel al 3% y molibdeno al 10%, 12% y 15%, y se evaluaron en la reacción de hidrodesoxigenación de fenol. El producto hidrotratado se analizó por cromatografía de gases para determinar la conversión del fenol y selectividad para establecer la ruta de hidrotratamiento predominante. La caracterización del soporte presenta resultados favorables en la obtención del SBA-15 obteniendo picos característicos en difracción de rayos X, el análisis morfológico muestra prismas hexagonales en forma de varilla cuyas direcciones son paralelas a un eje largo y en el análisis del área superficial usando el método BET fue de 638 m²/g, lo cual concuerda con la literatura reportada. La evaluación catalítica presenta mayor actividad con el catalizador de 10% de molibdeno predominando la ruta de desoxigenación directa obteniendo benceno como único producto.

Palabras clave. Fenol, hidrodesoxigenación, sílices.

Agradecimientos: Los autores agradecen al Instituto Politécnico Nacional, al Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada unidad Legaria, al Centro Interdisciplinario de Investigaciones y Estudios Sobre Medio Ambiente y Desarrollo y SECIHTI.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

IX.1 Las bombas de calor como tecnología para aprovechar las energías solar térmica y geotérmica

Ignacio Carvajal Mariscal

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Zacatenco, Laboratorio de Ingeniería Térmica e Hidráulica Aplicada, CDMX 07738, México

icarvajal@ipn.mx

De las fuentes de energía renovables, la energía solar es la más abundante, mientras que la energía geotérmica es la más constante. Aparte de las ampliamente utilizadas tecnologías para aprovechar la energía solar térmica, colectores y concentradores, se pueden usar también las bombas de calor. Estos dispositivos tienen una composición similar a la de un sistema de refrigeración por compresión mecánica de vapor, pero a diferencia de este el propósito es bombear calor, es decir, el calor absorbido en el evaporador se disipa en el condensador para un fin específico: calentamiento de agua, deshidratación de productos, calefacción, etc. La principal ventaja de las bombas de calor, respecto de otras tecnologías, es que aprovechan la energía solar térmica y la energía del ambiente cuando no se tiene ésta, por lo tanto, pueden operar durante la noche, en días nublados e incluso cuando llueve. Por otra parte, la energía geotérmica somera, hasta tres metros de profundidad, ha demostrado ser una fuente constante de calor de baja temperatura, menor a 40 °C. La ventaja principal es que no se tienen que perforar pozos profundos que representan un alto porcentaje en los costos de inversión. Las bombas de calor se usan para aumentar el flujo de calor que se absorbe del sustrato para aprovecharlo en la superficie en algún proceso industrial o en el calentamiento de agua y/o aire acondicionado domésticos. La tendencia actual son los sistemas de calentamiento y enfriamiento simultáneo, usando sistemas de refrigeración por absorción, como es el caso de la pasteurización y conservación de la leche.

Palabras clave: Bomba de calor; energía solar térmica; energía geotérmica somera; calentamiento y enfriamiento simultáneo; eficiencia energética.

IX.2 Celda electroquímica de prueba para la caracterización EPR *in situ* e *in operando* de electrodos de inserción del ion de litio en baterías

D. Ramírez-Rosales¹, J. Vazquez-Samperio², S.N. Arellano-Ahumada¹, G. Ramos³, I. González³

¹*Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas, UPALM, 07738 Ciudad de México, México.*

¹*Instituto Politécnico Nacional, Laboratorio Nacional de Conversión y almacenamiento de Energía, CICATA-Legaria, 11500, Ciudad de México, México.*

³*Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa, 09340, Ciudad de México, México.*

Comprender los mecanismos redox que ocurren en los electrodos durante el proceso de carga/descarga es fundamental para optimizar el rendimiento de las baterías. En experimentos de Resonancia Paramagnética Electrónica (EPR) *in operando*, las reacciones redox electroquímicas fundamentales se monitorizan modificando las propiedades físicas y químicas de los materiales utilizados como electrodos. La combinación de dos métodos analíticos registrados simultáneamente, los espectroscópicos y los electroquímicos, proporcionan información significativa al seguir la dinámica de los materiales durante la reacción redox en tiempo real.

La espectroscopia EPR *in situ* e *in operando* prácticamente no se ha utilizado para mediciones de componentes de baterías como los electrodos. Por lo tanto, esta forma de utilizar la espectroscopia EPR constituye una metodología novedosa e innovadora para obtener información sobre los procesos que ocurren en los electrodos de las baterías de inserción del ion Li durante su funcionamiento.

Actualmente, trabajamos y nos centramos en comprender el mecanismo de almacenamiento del litio (Li) en estructuras metalorgánicas (MOF) utilizando ácido tereftálico como ligante laminar, pirazina como pilar e iones manganeso y cobalto. En este estudio, se utilizan las MOFs con Mn, Co y una combinación de Mn-Co.

El objetivo de este trabajo es diseñar, fabricar, evaluar y acoplar una celda electroquímica a un espectrómetro EPR para monitorear vía *in-situ* e *in-operando* la estructura local de materiales utilizados como electrodos en baterías de inserción (MOFs) y, por tanto, comprender los cambios que ocurren en los materiales para proponer ajustes y mejorar sus propiedades.

IX.3 Estudio de diferentes mecanismos de recombinación de la celda solar SnSe usando SnTe como una capa transportadora de huecos

F.J. Sánchez Rodríguez^a, J.G. Ojeda Inzunza^a, A. Barraza Valencia^a, Levi Inzunza^a, Maykel Courel^b.

^aFacultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Culiacán, Sinaloa, 80010, México

^bCentro Universitario de los Valles (CUValles), Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca Km. 45.5, C.P. 46600, Ameca, Jalisco, México

El material semiconductor seleniuro de estaño (SnSe) tiene un potencial para aplicaciones de celdas solares. Sin embargo la tecnología basada en SnSe no ha podido superar la barrera de eficiencia del 5%, por esta razón es necesario estudiar los factores limitantes. En este trabajo se discute en detalle el análisis del impacto de los mecanismos de recombinación es decir, radiativos y no radiativos, debido a defectos en el bulto y en la intercara SnSe/CdS en el J-V característico de la celda solar SnSe/CdS usando telurio de estaño (SnTe) como una capa transportadora de huecos. Además se estudió el impacto del grosor de las capas SnSe y CdS, las resistencias en serie y en paralelo, la densidad de defectos en el bulto del SnS, la densidad de defectos en la intercara y la concentración de aceptores. En este estudio se demuestra que el dispositivo tiene un aumento de eficiencia del 0.69 % al 24.3%.

IX.4 Integración monolítica de GaAs sobre Si mediante autoensamble de nanofacetas: plataforma para tecnologías solares emergentes.

Reyna Méndez-Camacho^{1*}, Esteban Cruz-Hernández², Máximo López-López¹

¹Departamento de Física, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados CINVESTAV IPN, D. F, México.

*²Coordinación para la innovación de la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, S. L. P. México *reyna.mendez@cinvestav.mx*

La integración monolítica de GaAs sobre sustratos de Si es un punto clave para combinar la eficiencia de materiales III-V con la economía y escalabilidad del silicio. Esta integración ha estado históricamente limitada por problemas estructurales fundamentales, como la formación de dominios antífase (debido a la polaridad GaAs/Si), una alta densidad de dislocaciones por desajuste de red y tensiones en la interfaz asociadas a la diferencia en coeficientes de expansión térmica. Superar estas barreras, en particular la reducción de dislocaciones, es esencial para obtener dispositivos III-V sobre Si de alto rendimiento. En esta charla se presentará un enfoque teórico- experimental novedoso, basado en el autoensamble controlado de nanofacetas sobre sustratos de Si de alto índice, el cual permite superar dichos desafíos. Este proceso aprovecha mecanismos de autoensamble para generando una plataforma natural para el crecimiento dirigido de nanoestructuras de GaAs. Más allá de las aplicaciones en celdas solares convencionales, esta tecnología abre la puerta a una nueva generación de dispositivos en el campo de las tecnologías solares emergentes, incluyendo celdas tandem de alta eficiencia, fotodetectores autoalimentados, plataformas de fotónica integrada, sistemas de recolección solar, entre otros. Este enfoque multidisciplinario, que combina control morfológico, física de superficies y crecimiento epitaxial, posiciona al autoensamble de nanofacetas como una herramienta comprobada y versátil para avanzar hacia soluciones solares más eficientes, compactas y adaptables a diferentes escenarios tecnológicos.

Decimonoveno Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.

IX.5 Generación de CO₂ a partir del desperdicio de alimentos: Estrategias para mitigar su impacto ambiental

María de Lourdes Albor Aguilera

*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco,
07738, CDMX, México.
e-mail: mlalbora@ipn.mx*

La producción de CO₂ a partir del desperdicio de alimentos es una preocupación ambiental significativa a nivel mundial. Esto ocurre debido a las emisiones generadas durante la producción, transporte y descomposición de los alimentos no consumidos. El desperdicio de alimentos contribuye con el 10% de las emisiones globales de gases de efecto invernadero. Cuando los alimentos se descomponen en vertederos sin acceso a oxígeno se genera metano, el cual es un gas con un potencial de calentamiento global 25 veces mayor que el CO₂. Por otro lado, el desperdicio de alimentos también implica uso de recursos como agua, energía, tierra, fertilizantes, pesticidas, herbicidas lo que deja una huella de carbono considerable. Una de las estrategias para reducir las emisiones es reducir las pérdidas durante la producción, transporte y almacenamiento de alimentos. Se han desarrollado micro-sistemas de germinación de semillas de jitomate en un invernadero adosado, donde se ha llevado el estudio y análisis de como la radiación solar y la forma de riego modifica la salud y forma las plantulas de jitomate; lo cual puede prevenir la formación y proliferación de hongos durante su crecimiento, floración y etapa productiva. La instalación de sistemas agrofotovoltaicos adecuados puede ser una solución para reducir el consumo de energía convencional y si son instalados en las grandes urbes se dejaría de quemar combustible fósil en los camiones de transporte pesado. Abordar el desperdicio de alimentos no solo mejora la seguridad alimentaria, sino que también es crucial para mitigar el cambio climático.

Palabras clave: CO₂, desperdicio de alimentos, cambio climático.

Agradecimientos: Proyecto SIP 20251077.

IX.6 Simulación de celdas solares de película delgada y nanoestructurada bajo condiciones ideales y reales

Maykel Courel

Universidad de Guadalajara, CUValles, Ameca, Jalisco, México

maykel.courel@academicos.udg.mx

La simulación de celdas solares ha emergido como una herramienta de mucha utilidad a fin de tener un panorama más completo del funcionamiento de los dispositivos fabricados a nivel laboratorio. En esta plática presentaré los dos enfoques fundamentales utilizados en la simulación de celdas solares, que constituyen la analítica y la numérica, siendo cada uno muy útil en el entendimiento de la física del dispositivo. Además, se discutirá de la simulación bajo condiciones ideales, la cual constituye una referencia a fin de entender la potencialidad de la propuesta realizada, mientras que la simulación bajo condiciones reales permite la explicación de las causas de los bajos desempeños en las celdas obtenidas en el laboratorio y favorece la propuesta de rutas alternativas para mejorar el desempeño de la celda. Finalmente, la incorporación de nanoestructuras es un campo emergente en las celdas solares, pero resulta necesario establecer las condiciones bajo las cuales su uso es viable, por lo que este tema también será abordado.

IX.7 Propiedades optoelectrónicas de películas delgadas y nanoestructuradas de CdSe para su aplicación en celdas solares fotovoltaicas

Guillermo Leonardo Vidal Martínez¹, María de Lourdes Albor Aguilera^{1*}, Miguel Ángel González Trujillo², César Hernández Vasquez²

¹*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, 07738, CDMX, México.*

²*Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Ciencia Básica, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, 07738, CDMX, México.*

* e-mail: mlalbora@ipn.mx

En el desarrollo de celdas solares de CdTe, se ha demostrado que el proceso de selenización mejora la eficiencia de conversión fotovoltaica del dispositivo, dicho proceso consiste en un tratamiento térmico donde se introduce selenio en un atmósfera controlada, sin embargo, este proceso suele ser tóxico; con la finalidad de no utilizar dicho proceso se sugiere implementar una capa intermedia de CdSe. Se depositaron películas de CdSe por evaporación térmica en forma de película delgada y como película nanoestructurada; las propiedades estructurales, ópticas, morfológicas y eléctricas fueron estudiadas. El CdSe en forma de película delgada se obtuvo con un espesor del orden de 200nm, en el caso de la película nanoestructurada de 110 nm con tamaños de grano de orden micrométrico y nanométrico respectivamente. Los resultados de Rayos-X muestran una estructura cristalina tipo hexagonal; por otro lado las películas presentan un valor de brecha prohibida del orden de 1.67 eV. Con los resultados obtenidos se utilizó el CdSe como capa intermedia en la unión CdS/CdTe obteniendo un incremento en la eficiencia de conversión fotovoltaica del dispositivo.

Palabras clave: CdSe, celdas solares, película delgada, nanoestructura.

Agradecimientos: Proyecto SIP 20251077, SECIHTI.

IX.8 Estudio numérico en celdas solares de SnSSe bajo condiciones ideales con la incorporación de pozos cuánticos

E. Roblero-Castañón¹, I. Montoya De Los Santos², Karina G Rodríguez-Osorio¹, Maykel Courel¹

¹Centro Universitario de los Valles. Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca Km. 45.5 C.p. 46600 Ameca, Jalisco, México.

²Instituto de Estudios de la Energía, Universidad del Istmo, Oaxaca C.P. 70760, Santo Domingo Tehuantepec, México.

Email: eber.roblero9128@alumnos.udg.mx

En el presente trabajo se estudió el desempeño de celdas solares basadas en SnSSe, tanto en su configuración ideal sin nanoestructuras y con nanoestructuras de pozos cuánticos, debido a la similitud en sus propiedades y características que presentan los compuestos de SnS y SnSe, tal como su estructura ortorrómbica cristalina, el ancho de zona prohibida de 1.0 eV para el SnSe y 1.3 eV para el SnS, siendo posible aprovechar la razón composicional S/Se, adaptando las propiedades de cada uno de los compuesto en la celda solar de SnSSe. El estudio se realizó bajo condiciones ideales en el límite radiativo. Se analizó el efecto del espesor y la razón composicional en dispositivos sin nanoestructuras, obteniéndose eficiencias de conversión de energía para SnS de 28.85 % y 26.07 % para SnSe, respectivamente. Para el caso nanoestructurado, se evaluó, la cantidad de pozos cuánticos, el ancho de los pozos cuánticos, ancho de la barrera y la composición de pozos y barreras, alcanzando una eficiencia superior al 30 %. Los resultados indican que el uso de pozos cuánticos en celdas solares basadas en SnSSe mejora significativamente el desempeño fotovoltaico, abriendo nuevas posibilidades para el diseño de dispositivos solares de alta eficiencia.

IX.9 Mejoramiento de celdas solares fotovoltaicas tipo CdTe, usando Spiro-OMeTAD como capa HTL

Alejandro Emmanuel Medina-Bautista¹, María de Lourdes Albor-Aguilera¹, Maykel Courel²

¹ Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.

² Centro Universitario de los Valles (CUValles), Universidad de Guadalajara, Ameca, Jalisco 46600, México

Correo electrónico: amedinab1400@alumno.ipn.mx

Spiro-OMeTAD ha generado un notable interés en el desarrollo de celdas solares orgánicas e híbridas debido a sus excepcionales propiedades, que contribuyen a una mayor eficiencia del dispositivo. Este estudio propone una estrategia innovadora para mejorar el rendimiento de dispositivos fotovoltaicos basados en CdTe mediante la incorporación de Spiro-OMeTAD como Capa de Transporte de Huecos (HTL), utilizando el software de simulación SCAPS-1D. La arquitectura del dispositivo analizada, FTO/CdS/CdTe/HTL/Au:Cu, mostró un aumento significativo en la Eficiencia de Conversión de Potencia (PCE), alcanzando un valor máximo del 23%. Esta mejora se atribuye principalmente a la optimización del espesor de la capa absorbente de CdTe y al eficiente transporte de carga facilitado por la capa HTL de Spiro-OMeTAD. La investigación incluye evaluaciones cualitativas y cuantitativas de las propiedades de los materiales en todas las capas, destacando su impacto en el desempeño optoelectrónico de la celda solar. Además, la reducción del espesor de CdTe no solo incrementa la eficiencia, sino que también contribuye a la disminución de costos de material, un factor crucial para su implementación a gran escala. La integración de Spiro-OMeTAD en tecnologías basadas en CdTe surge como una alternativa prometedora frente a las HTLs convencionales, al mejorar la extracción de carga y reducir las pérdidas por recombinación.

Los resultados de la simulación destacan el papel de parámetros clave, especialmente aquellos relacionados con las capas absorbente y HTL, ofreciendo información valiosa sobre las estrategias de optimización. Estos hallazgos respaldan el desarrollo de tecnologías fotovoltaicas de película delgada, eficientes en costo y de alto rendimiento.

Palabras clave: CdTe, Spiro-OMeTAD, solar cells, HTL layer.

Agradecimientos: Proyecto SIP 20251077, SECIHTI, BEIFI

IX.10 Estudio de celdas solares de $\text{Cu}_2\text{ZnGe}(\text{S,Se})_4$ con la incorporación de pozos cuánticos

Jesús A. Jiménez-Santana, E. Roblero-Castañón, Maykel Courel

*Centro Universitario de los Valles (CUValles), Universidad de Guadalajara, Ameca, Jalisco
46600, México*

En este trabajo se destaca la importancia del uso de celdas solares para la generación de energía eléctrica, tanto en aplicaciones domésticas como industriales. Las celdas solares funcionan mediante el efecto fotovoltaico, un fenómeno en el cual ciertos materiales semiconductores absorben fotones de la luz solar y generan una corriente eléctrica. Su implementación busca alcanzar una mayor eficiencia energética y posicionarse como una alternativa viable frente a las fuentes de energía basadas en combustibles fósiles, cuya demanda sigue en aumento.

La investigación se enfoca en analizar los parámetros fundamentales que afectan el desempeño de las celdas solares, así como en explorar nuevos materiales con potencial aplicación en este campo. Entre los compuestos de interés se encuentran las kesteritas del tipo CuZnGeSSe , debido a sus propiedades físicas, su abundancia en la naturaleza y su menor costo en comparación con los materiales utilizados actualmente. Dado que existen pocos estudios sobre este material, es necesario desarrollar un modelo que permita describir su comportamiento a partir de sus características eléctricas y ópticas como material absorbente en celdas solares.

Una de las principales intenciones de este trabajo es el desarrollo de un modelo matemático que permita, a partir de las propiedades de los materiales, obtener la eficiencia que ofrece el compuesto CuZnGeSSe , tanto en su forma sin nanoestructura como con la incorporación de nanoestructuras. La integración de pozos cuánticos como nanoestructuras dentro de la celda solar permite modificar la densidad de estados electrónicos y ampliar el rango de absorción espectral del material. Esto puede conducir a una mejora en la eficiencia cuántica externa y, en consecuencia, a un incremento en la eficiencia de conversión de energía.

Los resultados obtenidos sin la incorporación de nanoestructuras muestran una eficiencia (η) de 29.5 %. Al incorporar pozos cuánticos como nanoestructuras, la eficiencia aumentó a 35.5 %. Este incremento significativo confirma el potencial de las nanoestructuras como una estrategia eficaz para mejorar el rendimiento de las celdas solares. Estos hallazgos refuerzan la importancia de seguir explorando nuevos materiales y arquitecturas en el diseño de dispositivos fotovoltaicos, con el fin de avanzar hacia tecnologías más eficientes, sostenibles y accesibles para la transición energética global.

IX.11 Estudios de simulación de SCAPS-1D sobre los factores limitantes de la eficiencia de celdas solares de Sb_2Se_3

Farhan Yousaf^{1*}, María de Lourdes Albor Aguilera¹, Maykel Courel Piedrahita²

¹Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, 07738, CDMX, México.

²Centro Universitario de los Valles (CUValles), Universidad de Guadalajara, Ameca, Jalisco 46600, México.

* e-mail: fyousaf2400@alumno.ipn.mx

El semiconductor Sb_2Se_3 ha recibido una gran atención como material absorbente en la tecnología fotovoltaica de película delgada debido a sus prometedoras propiedades. En este trabajo, se utiliza un método de simulación numérica con SCAPS-1D para explorar en profundidad la tendencia de rendimiento de eficiencia fotovoltaica en celdas de Sb_2Se_3 con alta eficiencia. Nuestro método consiste en un análisis exhaustivo del proceso de recombinación y del comportamiento de la interfaz, lo que representa una vía para estimar el efecto de los diferentes parámetros en el funcionamiento del dispositivo. El enfoque de simulación facilita la evaluación estratégica de las propiedades del material y heterojunción, e indica una dirección para la optimización del diseño del dispositivo. Este trabajo proporciona información teórica que puede optimizar la fabricación de celdas solares de Sb_2Se_3 eficientes.

Palabras clave: Sb_2Se_3 , celdas solares, proceso de recombinación, SCAPS-1D

Agradecimientos: Proyecto SIP 20251077, SECIHTI.

X.1 Sobre Potenciales Termodinámicos De La Magnetoelastocidad

G. Laffit N. Estrada and Rolando Pérez Alvarez

CInC-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos
gustavo.navarroest@uaem.edu.mx, rpa@uaem.mx

En 1958 Landau y Lifshitz [1], a partir de argumentos de simetría, propusieron la presencia del efecto magnetoeléctrico (ME) de manera teórica. Posteriormente Dzyaloshinskii (1959)

[2] y Rado (1961)[3] mostraron el efecto ME en Cr₂O₃, teórica y experimentalmente respectivamente. Soh y Liu [4] recapitulan los ocho potenciales termodinámicos que describen la Magnetoelastocidad (MEE) y las relaciones que hay entre cada uno de ellos; las cuales son transformaciones de Legendre.

F. O. Koenig en 1935 es quien registra en primera instancia una forma del cuadro termodinámico [5], sin embargo, fue Callen en 1985 [6] quien presenta el conocido diagrama de Born, mencionando que fue anotado por el Profesor Tisza tras una conferencia dada por el Profesor Max Born en 1929.

Los sistemas para los que un diagrama de Born contienen potenciales con dos variables independientes, el diagrama puede describirse usando un cuadrado, donde en cada arista se encuentran los potenciales y en los vértices de cada arista las dos variables independientes de cada potencial.

En el cartel registrado para participar en este evento se discuten las expresiones citadas, así como una propuesta de diagrama mnemotécnico para las relaciones constitutivas de un sistema de potenciales termodinámicos dependientes de tres variables. El diagrama de Born tridimensional, o diagrama Estrada-Pérez, es un diagrama que condensa las relaciones que existen en un sistema descrito por potenciales termodinámicos cuadráticos de tres variables independientes. Para el diagrama Estrada-Pérez, al ser tridimensional, se presenta como un octaedro donde ahora los potenciales se ubican sobre las caras y las variables sobre los vértices -o esquinas- de la figura. Cabe mencionar que si aplicamos este diagrama con la teoría Magnetoelastocidad, se pueden recuperar los diagramas de Born para la piezoelectricidad, piezomagnetismo y magnetoelastocidad.

X.2 From Moiré Nanostructures to Moiré Neurobiology: Ultraweak Photon Emissions, Coherent States, and a New Physics of the Brain

David Quesada Saliba

Clinical Systems Biology Group at Institute for Neuro-Immune Medicine, College of Osteopathic Medicine, NOVA Southeastern University, Ft. Lauderdale/Davie, FL 33228, USA
dquesada@nova.edu

Recent breakthroughs in condensed matter physics, particularly in twisted bilayer and multilayer graphene, have revealed how geometric misalignment at the nanoscale can give rise to flat bands, correlated quantum states, and emergent topological behaviors — a field now broadly known as Moiré physics. In parallel, advances in quantum biology suggest that coherent dynamics, vibrational modes, and ultraweak photon emissions may play a previously underappreciated role in living systems, particularly in the brain.

This work proposes a radical interdisciplinary synthesis: a new framework of Moiré neurobiology, wherein cytoskeletal structures such as microtubules—composed of helically arranged tubulin dimers—are re-examined as biological analogues of Moiré double-walled nanotubes. Due to their intrinsic helical symmetry, layered pseudo-periodicity, and dielectric anisotropy, microtubules may host structural and vibrational interference patterns akin to Moiré superlattices, giving rise to localized or collective excitonic and vibrational states.

We explore the possibility that pressure waves associated with action potentials, as described in the electromechanical soliton model of neuronal firing, may act as nonlinear pumps enabling Fröhlich-like coherence within microtubular networks. These vibrational condensates, in turn, may facilitate ultraweak photon emissions—a phenomenon experimentally observed in neural tissue and potentially linked to biophotonic signaling.

Integrating concepts from quantum field theory, optomechanics, and nonlinear dynamics, we propose that such vibrational-photonic couplings in microtubules may underpin a quantum-coherent substructure of cognition, enabling information processing modes not accounted for by classical electrophysiology.

This emerging picture hints at a new physics of the brain, where geometry, coherence, and biophotonics intersect — potentially opening pathways to understanding consciousness, memory encoding, and brain-environment coupling from a fundamentally novel perspective.

X.3 Influencia del desorden estructural en los coeficientes de rectificación óptica no lineal, generación del segundo y tercer armónico en un sistema delta-dopado doble en GaAs tipo n

Eddy Rabanales Marquez^{1,2}, Humberto Noverola Gamas², Luis Manuel Gaggero Sager³,
Outmane Oubram¹

¹Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México

²División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Cunduacán, Tabasco, México

³Centro de Investigación en Ingenierías y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa 62209, Cuernavaca, Morelos, Mexico

Correo electrónico: rabasoft@gmail.com

Los semiconductores de GaAs delta-dopados dobles han demostrado ser materiales fundamentales en el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos avanzados, especialmente en procesos de generación de armónicos y rectificación óptica no lineal [1,2]. Sin embargo, la variabilidad en los procesos de fabricación introduce desorden estructural, que afecta sus propiedades ópticas [3,4]. Estudios previos en confinamiento cuántico indican que la distribución de cargas en heteroestructuras influye en la respuesta no lineal de estos materiales [3-5].

En este trabajo, se analiza estadísticamente el efecto del desorden estructural, definido por la distancia entre capas dopantes (L) y la densidad de dopaje, sobre la rectificación óptica no lineal (NOR), la generación de segundo armónico (SHG) y de tercer armónico (THG) en GaAs tipo n

\square -dopado doble. El modelo se fundamenta en la masa efectiva y la aproximación de Thomas-Fermi. Utilizando la teoría de matriz densidad, se calcularon los coeficientes no lineales del sistema. Para simular el efecto del desorden, se introdujo un término de ruido blanco (\square) en los parámetros de fabricación, realizando 5,000 simulaciones para evaluar las variaciones en la estructura y las propiedades ópticas resultantes. Los resultados indican que, para dispersiones mayores al 20% en la densidad de dopaje, las propiedades ópticas se deterioran significativamente. Además, la respuesta NOR muestra mayor sensibilidad a variaciones en la distancia de dopaje superiores a $1L$, mientras que las propiedades SHG y THG toleran hasta $2L$ de desorden. Estos hallazgos son relevantes para el diseño de materiales resistentes al desorden en aplicaciones fotónicas y de telecomunicaciones.

Agradecimientos: Este trabajo fue apoyado por el programa PISA 2024-1 UJAT, el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, proyecto número 20240306 y la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI), Mexico.

- [1] M. Jaouane et al, Modeling n-type GaAs/AlGaAs double quantum well properties with Schrödinger-Poisson equations, *Adv. Theory Simul.*, (2025)
- [2] Salman Durmuslar et al, Effects of doping concentrations and position-dependent mass on the nonlinear optical properties of asymmetric double delta-doped GaAs quantum wells, *Applied Physics B*, **130**, 174 (2024)
- [3] H. Sayrac, M. Jaouane et al, Modulation of nonlinear optical rectification, second, and third harmonic generation coefficients in n-type quadruple δ -doped GaAs quantum wells under external fields, *Physica B*, **690**, (2024)
- [4] H. Noverola-Gamas¹, L G Macias Rojas et al, Disorder effect on intersubband optical absorption of n-type δ -doped quantum well in GaAs, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **35**, (2023)
- [5] Ram Chandra Swain, Ajit Kumar et al, Improvement of electron mobility mediated by interface roughness scattering in pseudomorphic GaAs/In_{0.15}Ga_{0.85}As asymmetric double quantum well structure, *Materials Today: Proceedings*, (2023)

X.4 Estimating the mean grain size of nanostructured alloys synthesized by mechanical alloying by using gene expression programming

Javier Ruidiaz¹, Zulia I. Camaano¹, and D. Quesada-Saliba²

¹Departamento de Física, Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia

²Computational Clinical Systems Biology Group, Institute for Neuro-Immune Medicine, K. C. Patel College of Osteopathic Medicine, NOVA Southeastern University, Florida 33128, USA

*jruidiaz@mail.uniatlantico.edu.co
zuliacaamano@mail.uniatlantico.edu.co
dquesada@nova.edu*

One of the most important factors in nanocrystalline alloys is the mean grain size because it determines their physical properties. This parameter often is estimated from X-ray analysis appealing to three methods: Rietveld, Williamson-Hall and Scherrer. Nevertheless, it would be worth having an estimate of it in advance, by considering the key physical and chemical parameters driving the grain formation process. This communication addresses such estimation for the case of grains obtained by mechanical alloying (MA), a process in which particles are subject to constant grinding under the effects of fracture, deformation and welding. Several factors influence the effectiveness of the process: type of mill, speed of milling, ball to powder mass ratio, milling time, milling medium, milling atmosphere among others. In this work, milling speed, ball mass ratio, ball to powder mass ratio, and milling time were selected as key predictors for grain size. In this end, a genetic algorithm method was used as an optimization computational technique following the gene expression programming (GEP) methodology and was implemented using Python programming language. The developed algorithm was tested with nanostructured alloys based on FeCo synthesized by mechanical alloying.

**X.5 Impact of Temperature on Conductance and Thermoelectric Performance
in Self-Similar Graphene-Based Structures**

**Mohammed Miniya¹, Yamlet Rodríguez-Lazcano¹, David Quesada Saliba²,
Outmane Oubram³, Sarah Ruth Messina Fernández¹**

*¹Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de
Nayarit, 63155 Tepic, Nayarit*

*²Computational Clinical Systems Biology Group, INIM, Nova Southeastern University,
Ft. Lauderdale/Davie, FL, USA*

*³Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de
Morelos. Av. Universidad 1001, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México*

Aperiodic structures, such as self-similar configurations, offer a powerful approach for modulating the band gap, redistributing the density of states, and engineering energy regions with enhanced localization effects in graphene monolayers. In this work, we investigate the temperature dependence of electrical conductance, as well as thermoelectric properties including the Seebeck coefficient, power factor, and figure of merit, using a self-similar structure based on a graphene monolayer. To compute conductance at different temperatures, we employed the transfer matrix formalism, the Landauer–Büttiker approach, and the Fermi–Dirac distribution. We found that increasing temperature reduces conductance, and similar decreasing trends were observed for the Seebeck coefficient, power factor, and figure of merit. Additionally, we show that it is possible to estimate the ZT value of such self-similar structures at low temperatures.

X.6 Acoplamiento luz materia en espejos de Bragg

J. Andrés Rojas-Sánchez

Instituto de Física, UNAM
Correo electrónico: jarosa99.san@gmail.com

Se ha implementado la técnica de depósito *Dip Coating* para sintetizar películas delgadas de polímeros con el objetivo de construir un espejo dieléctrico o también conocido como DBR (Double Bragg Reflector) por sus siglas en inglés. Con este sistema es posible diseñar una nano-cavidad óptica en la cual se introducirá un emisor cuántico, en este caso, una perovskita híbrida orgánica-inorgánica $(PEA)_2PbI_4$. Con la nano-cavidad acoplada al emisor se pretende explorar los regímenes de interacción entre la luz y la materia mediante el análisis de la dispersión de los modos del sistema medidos con espectroscopía de Fourier.

Agradecimientos

Beca Nacional para Estudios de Posgrado 2025 SECIHTI

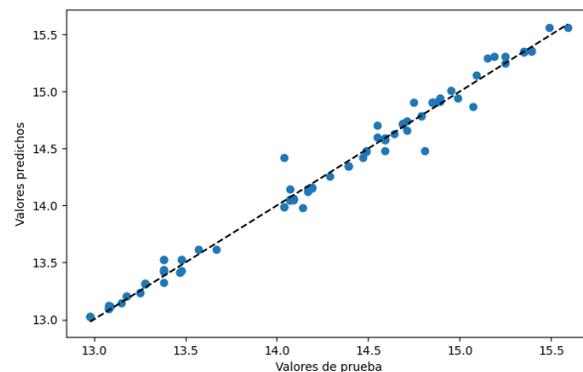
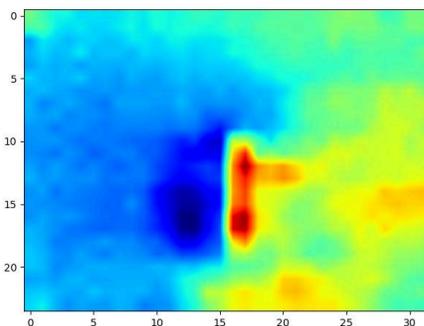
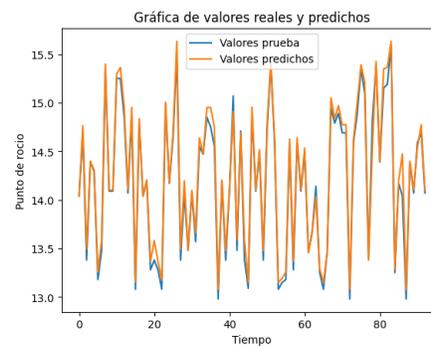
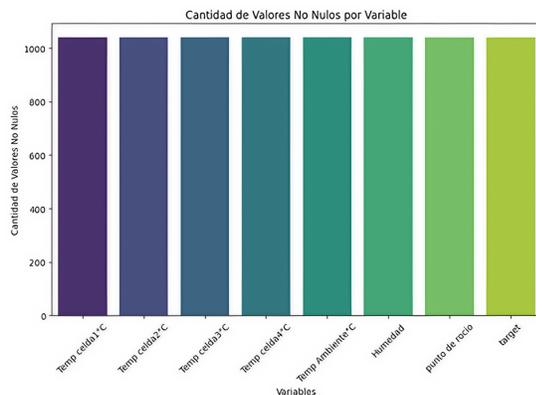
X.7 Implementación Con Técnicas De Ia Para Predecir Captación De Agua Y Otros Parámetros De Un Prototipo Con Celdas Peltier

Alexis Angeles Robles¹, Roy Lopez Sesenes², Outmane Oubram³

Correo electrónico: alexis.angeles0160@gmail.com

El presente proyecto tiene como objetivo la predicción del punto de rocío con ayuda de redes neuronales artificiales y regresión lineal. Las bases de datos son recabadas de diferentes sensores que monitorean el comportamiento del dispositivo durante el mismo se encuentra en funcionamiento. Así mismo se menciona que se remplazan algunos sensores que miden la temperatura de diferentes puntos del prototipo, por una cámara térmica, la cual hace eficiente la captura de información del interior del dispositivo. Una vez obtenida una red neuronal funcional y con un margen de error pequeño se procede a realizar el análisis de sensibilidad, para obtener los pesos más significativos de la red neuronal artificial, con la finalidad de poder controlar algunas variables que influyen

en la captación de agua, todo ello para poder captar más agua con menos recursos. Con técnicas de machine learning, podemos hacer un modelo para clasificar información en este caso se utilizan Maquinas de Soporte Vectorial y Arboles de Decisión. Se toma como pauta el valor de la humedad en el ambiente para determinar si el resultado del punto de rocío es eficiente o deficiente, en la captación de agua. A continuación, se muestran algunos resultados obtenidos durante la ejecución. [1].



X.8 Fuzzy Logic-Driven Cellular Automaton for Pedestrian-Vehicle Interaction at Crosswalks

Jeferson Daniel Rosero Benavides¹, José Roberto Pérez Cruz¹, Noureddine Lakouari³

¹Department of Computer Science, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE),

Correo electrónico: jdannyrb@inaoe.mx

We propose a new cellular automaton model to simulate traffic and pedestrian interactions near a crosswalk. Pedestrians make their decisions using fuzzy logic, waiting or crossing, thereby introducing uncertainty into the local dynamics. The observations suggest that these local interactions could produce macroscopic consequences, such as Bose-Einstein condensation, resulting in vehicle queues being squeezed ahead of the crosswalk and free space accumulating behind it. This pedestrian-driven behavior acts as a bottleneck, significantly affecting both vehicle dynamics and traffic flow. A phase diagram for different configurations of the system is presented. It illustrates that the region is characterized by four distinct phases, where the traffic flow is uncoupled from the injection rate of vehicles and depends only on pedestrian input. Above a certain value, the system makes a transition in which vehicle traffic is entirely stopped, leading to zero flow.

X.9 Propiedades de transporte de valles-espines y magnetorresistencia en estructuras aperiódicas basadas en WSe₂

L.A. Díaz-Valerio, R. Rodríguez-González, S. Molina-Valdovinos and I. Rodríguez-Vargas

Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carratera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida, 98160 Zacatecas, Zac., México. Correo electrónico: luisdiaz@uaz.edu.mx

En este estudio se investigan las propiedades de polarización de valles-espines y magnetorresistencia en estructuras aperiódicas basadas en TMDs en especial en dicalcogenuro de tungsteno (WSe₂ por sus siglas en inglés). Se distribuyen tiras ferromagnéticas de forma aperiódica en las regiones de barrera para generar estructuras tipo Cantor, las tiras ferromagnéticas inducen el efecto de proximidad magnética en el WSe₂. Con ayuda del método de matriz de transferencia, podemos obtener las propiedades de transmisión. Dentro de este contexto, estudiamos diferentes variantes aperiódicas para diferentes generaciones para el Cantor triádico y Cantor asimétrico, tomando en cuenta la configuración de magnetización paralela (PM) y antiparalela (AM). Se estudian las polarizaciones de valles-espines y la TMR en estructuras aperiódicas variando los parámetros fundamentales como el número de generación, ancho de partida y la intensidad de campo de intercambio, obteniendo lo que se conoce como estructuras versátiles [1,2].

X.10 Estimación de la producción en invernaderos bajo condiciones climáticas y de suelo mediante inteligencia artificial e internet de las cosas

M. Pablo Hernández¹, Dr. Outmane Oubram², Dr. Pedro Moreno³

¹DIATS

²FCQeI

³FCAeI

Correo electrónico: pabloperalta.atl@gmail.com

Recientemente, la revolución de la Industria 4.0 se ha extendido como parte integral de los cambios sociales y tecnológicos bajo el paradigma de las ciudades inteligentes (Sokolov et al., 2020; Ustundag & Cevikcan, 2018). En este contexto, la agricultura debe brindar soluciones prácticas que beneficien la demanda de consumo de alimentos incorporando tecnología basada en la Industria 4.0. de manera sostenible. La agricultura sostenible se refiere al ciclo de producción, cosecha y distribución de todo lo relacionado con la agricultura sin desperdicio. Hoy en día, la agricultura utiliza tecnología avanzada para aumentar la productividad optimizando los recursos de forma controlada

**X.11 Estudio de Propiedades Ópticas de Cristales Fotónicos Temporales:
Caracterización Modal, Propagación de Ondas y Amplificación de Señales**

Antonio Mayorquin Galicia¹, Shunashi Guadalupe Castillo López²

¹Facultada de Ciencias, UNAM

²Instituto de Física, UNAM

Correo electrónico:

mayorquin@estudiantes.fisica.unam.mx, shunashi@fisica.unam.mx

Este trabajo tuvo como objetivo estudiar, desde una perspectiva teórica y computacional, las propiedades electromagnéticas de los cristales fotónicos temporales (PTCs, por sus siglas en inglés), en el marco del electromagnetismo clásico. El enfoque principal se centró en analizar el crecimiento exponencial de la intensidad de ondas electromagnéticas que incidían dentro de las bandas prohibidas en el espacio energía-momento de estos sistemas. Con miras a su aplicación práctica, se consideraron diversas modificaciones del modelo ideal para acercarlo a condiciones físicas más realistas. Entre ellas, se incluyeron la dispersión óptica del medio y la extensión espacial finita del material. Asimismo, se exploraron distintas formas de modulación temporal de los parámetros ópticos del sistema, evaluando los métodos de solución más relevantes, sus ventajas, limitaciones y posibles estrategias híbridas para aprovechar lo mejor de cada enfoque. Se analizaron las variaciones en los diagramas de bandas de estos PTCs, sus campos eléctricos, y los coeficientes de transmisión y reflexión. Particularmente, se encontró que en PTCs dispersivos surgen bandas prohibidas simultáneas en energía y momento, donde la dispersión óptica domina sobre los efectos de la modulación temporal en los diagramas de banda. Además, en un cristal de extensión finita, una frecuencia puede convertirse en múltiples armónicos que exhiben distintos patrones de transmisión y reflexión.

X.12 Diseño De Prototipo Para El Conteo De Agua Captada

**Marco Antonio Ramirez Rubio¹, Yair Alejandro Gutiérrez Álvarez¹, Roy López Sesenes¹,
Outmane Oubram¹, Hugo Albeiro Saldarriaga Noreña²**

*¹Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av.
Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, Morelos.*

*²Centro de investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av.
Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, Morelos.*

*yair.gutierrez@fcqei.uaem.edu.mx
marco.ramirezrub@fcqei.uaem.edu.mx*

El presente informe describe el diseño, análisis e implementación de un prototipo orientado al **conteo preciso del agua captada** mediante un sistema optoelectrónico. Este dispositivo ha sido desarrollado para aplicaciones industriales y de laboratorio que requieren alta precisión y confiabilidad en la cuantificación de volúmenes hídricos recolectados, como parte de sistemas de captación de agua atmosférica u otras fuentes.

El prototipo se basa en una **barrera láser**, conformada por un diodo láser y una fotorresistencia, capaz de detectar la interrupción del haz de luz producida por el paso de cada gota de agua. Esta técnica permite un conteo exacto sin depender de las características visuales del líquido, lo que incrementa su versatilidad.

El sistema es controlado mediante una **plataforma Arduino**, lo que brinda flexibilidad para su adaptación a distintos entornos experimentales. Incorpora una pantalla LCD con adaptador I2C para la visualización en tiempo real, un módulo RTC DS3231 para el registro temporal de los datos, y un lector de tarjetas SD para el almacenamiento continuo de la información. Esta integración permite realizar análisis estadísticos detallados sobre la cantidad de agua recolectada en intervalos definidos.

Gracias a su capacidad para detectar interrupciones mínimas del haz láser, el sistema muestra una **alta eficiencia y exactitud**, posicionándose como una herramienta útil para **la mejora de procesos relacionados con la gestión del agua captada**. Este proyecto busca no solo validar la funcionalidad del diseño, sino también demostrar su aplicabilidad en iniciativas de uso eficiente y sostenible del recurso hídrico.

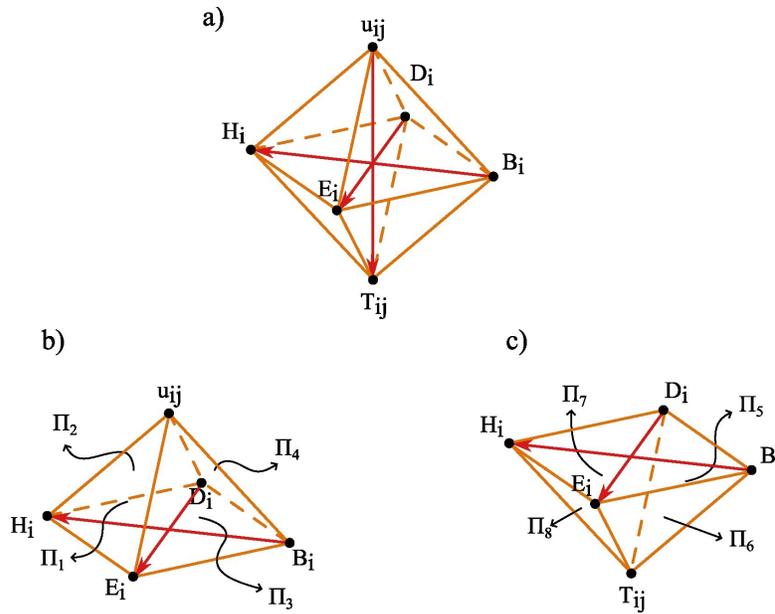


Figure 1: Diagrama Estrada-Pérez

Referencias.

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Electrodynamics of Continuous Media*. Ed. by Pergamon Press. USSR Academy of Sciences, 1960.
- [2] I. E. Dzyaloshinskii. “On the Magneto-Electrical Effect in Antiferromagnets”. In: *Journal of Experimental and Theoretical Physics (U.S.S.R.)* 37.3 (1959). URL: <http://jetp.ras.ru/cgi-bin/e/index/e/10/3/p628?a=list>.
- [3] G. T. Rado. “Mechanism of the Magnetoelectric Effect in an Antiferromagnet”. In: *Phys. Rev. Lett.* 6 (11 June 1961), pp. 609–610. DOI: 10.1103/PhysRevLett.6.609. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.6.609>.
- [4] A. K. Soh and J. X. Liu. “On the Constitutive Equations of Magnetoelastic Solids”. In: *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 16 (2005).
- [5] F. O. Koenig. “Families of Thermodynamic Equations. I The Method of Transformations by the Characteristic Group”. In: *The Journal of Chemical Physics* 3.1 (Jan. 1935), pp. 29–35. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.1749549. eprint: https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/3/1/29/18788358/29_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1749549>.
- [6] H. B. Callen. *Termodinámica: introducción a las teorías físicas de la termostática del equilibrio y de la termodinámica irreversible*. Alfa Centauro, S.A., 1985. ISBN: 9788472880429. URL: <https://books.google.com.mx/books?id=cLLAAAAACAAJ>.

X.13 Demostración experimental de un mecanismo para generar polaritones pesados robustos en cavidades fuertemente acopladas

Rodrigo Sanchez Martinez, Yesenia Angelica Garcia Jomaso, David Ley Dominguez, Cesar L. Ordonez Romero¹, Hugo A. Lara Garcia, Arturo Camacho Guardian, Giuseppe Pirruccio

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. Apartado Postal 20-364. Ciudad de México C.P. 01000, México.

rodrigo.smtz@icloud.com

En este trabajo presentamos el diseño teórico y la demostración experimental de un mecanismo que permite proteger estados híbridos luz-materia exóticos, conocidos como polaritones de intercavidad, en sistemas de cavidades ópticas unidimensionales fuertemente acopladas. Estos estados tienen la peculiaridad de tener sus componentes de luz y materia espacialmente separados[1].

Dado que el sistema presenta una configuración de tres niveles análoga al esquema Λ utilizado en física atómica, es posible establecer una condición energética que garantiza la robustez del polaritón de intercavidad, de forma análoga a la apertura de una ventana de transparencia electromagnética. Esta condición se manifiesta como una dispersión aplanada del modo polaritónico intermedio, asociada a una masa efectiva elevada y ajustable, lo que permite generar polaritones pesados sin comprometer la coherencia de la mezcla luz-materia ni la separación espacial entre sus componentes excitónicos y fotónicos. El análisis de la reflectancia resuelta en ángulo y espectro, medida en el Laboratorio de Nanofotónica Avanzada del Instituto de Física, confirma las predicciones teóricas y pone en evidencia la viabilidad experimental del mecanismo propuesto. Estos resultados abren nuevas posibilidades para aprovechar los polaritones de intercavidad como una herramienta para intensificar efectos no lineales en sistemas polaritónicos, así como para su implementación en aplicaciones avanzadas, como plataformas de simulación cuántica.

Agradecimientos

R. Sanchez Martinez agradece a la Secretaria de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación por la beca otorgada (CVU 1101518) para el desarrollo del doctorado en Ciencias Física dentro del instituto de Física de la UNAM.

[1] Yesenia A. García Jomaso et al., Intercavity polariton slows down dynamics in strongly coupled cavities, *Nature Communications* **15.**, 2915. (2024)

X.14 Influencia del diseño estructural en las propiedades de transporte y rendimiento termoeléctrico de superredes con compuerta de germaneno: estudio de configuraciones periódicas y aperiódicas

B. D. Gutierrez-Reyna¹, Z. Zarhri¹, O. Oubram¹, L. M. Gaggero-Sager²

¹ *Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, Cuernavaca, 62209 Morelos, México*

² *CIICAp, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México*
Correo electrónico: brian.gutierrez@fcqe.uaem.edu.mx

Este estudio se enfoca en el germaneno, un material bidimensional similar al grafeno con propiedades electrónicas únicas que lo hacen especialmente prometedor para aplicaciones electrónicas y termoeléctricas. En particular, se examinan configuraciones periódicas y aperiódicas de electrodos con compuerta aplicados sobre germaneno, conocidas como superredes con compuerta (GeGSLs).

Utilizamos un modelo de baja energía centrado en el punto de Dirac para calcular la transmisión electrónica, la conductancia y el coeficiente de Seebeck mediante el método de la matriz de transferencia, el formalismo de Landauer-Büttiker y la relación de Cutler-Mott, respectivamente.

Los resultados revelan que las superredes aperiódicas presentan ventajas notables: logran mayores valores del coeficiente de Seebeck y del factor de potencia en comparación con las superredes periódicas, lo cual es favorable para la eficiencia termoeléctrica. Además, se encontró que, al aumentar el número de barreras, la conductancia disminuye, pero el rendimiento termoeléctrico mejora, lo que abre la posibilidad de ajustarlo según los requisitos del sistema.

A diferencia de los sistemas basados en grafeno y siliceno, que han sido ampliamente investigados, el estudio de superredes de germaneno con compuerta ha recibido poca atención, especialmente en lo que respecta a sus propiedades termoeléctricas. Este trabajo amplía el conocimiento actual sobre GeGSLs y proporciona una base sólida para futuras investigaciones orientadas al desarrollo de tecnologías de conversión de energía.

Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo económico otorgado para la realización de mis estudios de doctorado.

X.15 Efecto de índice casi-cero en cristal bidimensional usando barras de radios diferenciadas

Marco A. Tun-Carrillo¹, Miguel E. Mora-Ramos², Hernán A. Gómez-Urrea³, Ignacio Pérez-Quintana⁴

¹Posgrado en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad No. 1001,, CP. 62209, Cuernavaca, Morelos, México

²Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad No. 1001, CP. 62209, Cuernavaca, Morelos, Mexico

³Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, 050026, Medellín, Colombia

⁴Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán, Industrias No Contaminantes S/N, Sin Nombre de Col 27, CP. 97302, Mérida, Yucatán, México.

Correo electrónico: marco.tun@uaem.edu.mx

La manipulación de la luz continúa siendo uno de los desafíos más relevantes en la óptica moderna. Muchas interacciones entre la luz y la materia son intrínsecamente débiles y difíciles de confinar, lo que generalmente exige el uso de medios macroscópicos diseñados con precisión. Un ejemplo de ello es la utilización de estructuras metamateriales cuidadosamente desarrolladas [1]. La concepción de los metamateriales representa una oportunidad innovadora para el control de la propagación de la luz, posibilitando, entre otros efectos, el aumento de las no linealidades ópticas, la modificación de las propiedades de transmisión en guías de onda y la obtención de distribuciones de fase casi constantes [2]. En este contexto, se ha diseñado una estructura compuesta por barras de SiO₂ y TiO₂ con radios diferenciados, que permite obtener un comportamiento de índice de refracción casi nulo en la región espectral comprendida entre 2.1×10^{14} y 2.2×10^{14} Hz (aproximadamente de 1360 a 1420 nm), con un valor máximo en 2.1116×10^{14} , ver Fig.1b. Este resultado posiciona al diseño como un candidato viable para aplicaciones tecnológicas en el ámbito de la manipulación avanzada de la luz.

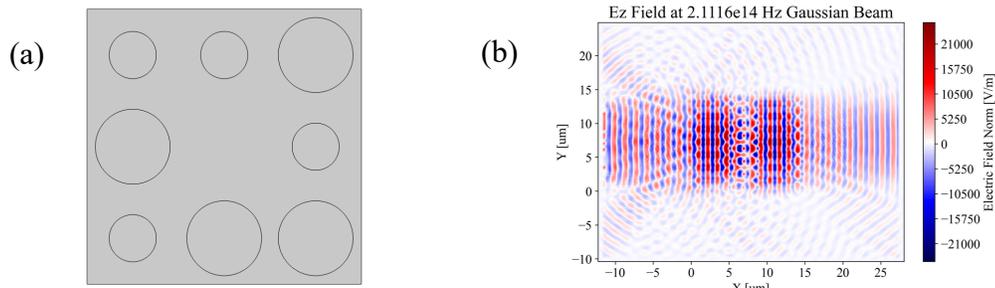


Figura 1. (a) Esquema de la celda unitaria que conforma el cristal bidimensional. (b) Efecto de índice casi-cero observado en la frecuencia de 2.1116×10^{14} Hz de un cristal de 8×8 celdas unitarias.

[1] Liberal, I., & Engheta, N. Near-zero refractive index photonics, *Nature Photonics*, 11, 3 (2017).

[2] Vertchenko, L., DeVault, C., Malureanu, R., Mazur, E., Lavrinenko, A. Near-Zero Index Photonic Crystals with Directive Bound States in the Continuum, *Laser & Photonics Reviews*, 15, 7 (2021).

X.16 Estudio DFT de la perovskita BaSnO_3 para aplicaciones opto – eléctricas y celdas solares

Francisco Javier Martinez Fabian ¹, Zakaryaa Zarhri².

¹ Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería

² Universidad Autónoma del Estado de Morelos,

Correo electrónico:

z.zarhri@gmail.com

Desarrollar materiales avanzados para tecnologías solares, en el estudio de óxidos conductores y transparentes (TCO), que constituyen la primera capa de estos.

La problemática principal es el uso extendido del óxido de indio y estaño (ITO) en las celdas solares de perovskita.

El BaSnO_3 , una perovskita prometedora por su estabilidad y propiedades ópticas. Buscamos mejorar sus características mediante la dopaje con flúor.

Este proyecto contribuye a los objetivos de los PRONECES, particularmente en lo relacionado con la autonomía tecnológica, sostenibilidad energética y el uso responsable de los recursos materiales, avanzando hacia soluciones viables para el desarrollo de tecnologías limpias accesibles y seguras.

Agradecimientos

Se extiende un cordial agradecimiento a la SECIHTI por su apoyo económico. y otra vez mis agradecimientos a la FCQeI por esta oportunidad de estudiar en este posgrado, y al Dr. Zakaryaa Zarhri por su apoyo en la dirección de esta tesis. Al Dr. Outmane Oubram por invitarme a formar parte de este posgrado en la facultad FCQeI.

X.17 Uso de estructuras de siliceno para mejorar las propiedades termoeléctricas

Marla N. Hernández-Delgado, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas
Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la luz y la materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160 Zacatecas, Zac., México
Correo electrónico: marlanayeli1826@gmail.com

La demanda exponencial de energía que existe mundialmente se puede atacar con estrategia de termoelectricidad, utilizando una máquina térmica, realizando una estimación midiendo su capacidad para generar una potencia adecuadamente buena con una considerable eficiencia, a esta distinción no es más que una eficiencia máxima potencia (EMP) la cual. Se realiza un estudio de las propiedades termoeléctricas en estructuras resonantes basadas en siliceno, con el objetivo de indagar la optimización de dichas propiedades. Unas estructuras resonantes se generan por medio de electrodos ferromagnéticos, obteniendo así regiones de barreras de potencial. Este tipo de estructuras está conformado por dos barreras centrales, a las cuales se les incorporan regiones con cavidades a los extremos, es decir, se consideran barreras modulables (alto y ancho) en los extremos. Se proponen tres diferentes configuraciones para analizar cuál de ellas presenta la mejor optimización. Nuestra metodología se basa en el método de la matriz de transferencia para calcular la transmitancia, así mismo el formalismo de Landauer-Büttiker para obtener la conductancia, de igual modo con el enfoque de los coeficientes de transporte se pretende determinar el coeficiente Seebeck, la figura de mérito (ZT), la potencia máxima y la eficiencia. En este trabajo, reportamos una función de transmisión en forma de “boxcar shape” que es una región rectangular amplia de transmisión perfecta [1, 2], dado que se sabe que cuando llega a tener esta función de transmisión el sistema logra optimizar su potencia de salida y eficiencia [3]. Se busca el ancho óptimo del boxcar shape, de manera que se mejoren las propiedades termoeléctricas. Además, investigamos las propiedades termoeléctricas mencionadas con base a la mejor función de transmisión boxcar shape encontrada.

Agradecimientos:M.N.-H-D agradece a SECIHTI por la beca de posgrado para la maestría

[1] Whitney, R. S. (2014). Most efficient quantum thermoelectric at finite power output. *Physical review letters*, 112(13), 130601.

[2] Mukherjee, S., & Muralidharan, B. (2019). Electronic Fabry-Perot cavity engineered nanoscale thermoelectric generators. *Physical Review Applied*, 12(2), 024038.

[3] Priyadarshi, P., Sharma, A., Mukherjee, S., & Muralidharan, B. (2018). Superlattice design for optimal thermoelectric generator performance. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51(18), 185301.

X.18 Estructura electrónica por defectos lineales en cuasicristales

Ernesto Huipe Domratcheva¹, Uriel Alberto Díaz Reynoso², Oracio Navarro¹

¹ *Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,*

*Antigua Carretera a Pátzcuaro 8701, Colonia Ex Hacienda de San José de la Huerta
C.P. 58190, Morelia, Michoacán, México.*

² *Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México,
Km 107 Carretera Tijuana – Ensenada, C.P. 22800, Ensenada, Baja California, México.*

Correo electrónico:

ehuipe@pceim.unam.mx

La aparición de transición superconductor en grafeno bicapa rotado, abre un nuevo panorama en el estudio de correlación electrónica en sistemas de bajas dimensiones. Se cree que la aparición de un patrón de moiré formado por las dos capas, juega un rol central para la existencia del estado superconductor [1]. El estudio de patrones de moiré se ha extendido a diversos materiales y sistemas, incluidos los cuasicristales, materiales que presentan simetría traslacional de largo alcance y una simetría rotacional prohibida. Estos cuasicristales pueden ser cuasiperiódicos en todas direcciones o presentar alguna dirección periódica. La teselación de Penrose es un modelo que consiste en dos celdas unitarias y es el más usado para representar y estudiar sistemas cuasicristalinos, debido a que presenta el mismo patrón de difracción que los cuasicristales. Los cuasicristales decagonales son planos cuasiperiódicos apilados periódicamente en dirección normal a estos. Un mal apilamiento de una capa en este sistema genera un patrón de moiré conformado por varias redes de rectas que se intersecan. Este mal apilamiento se ve como un defecto, y es denominado “fasón”. El fasón es un reacondo discreto de átomos en donde se ve un cambio de configuración de celdas dentro de la red. Estos pueden ser puntuales o lineales, por lo que se pueden difundir a través de la red, o aparecer como líneas que atraviesan el medio, denominados gusanos de Conway [2]. En este trabajo acoplamos dos gusanos de Conway y analizamos cómo cambia la estructura electrónica cuando hay un fasón en uno de los gusanos. Resolvemos el modelo de amarre fuerte de los gusanos acoplados usando las celdas unitarias de una teselación de Penrose. Encontramos que la presencia del fasón se visibiliza mediante la aparición de un modo cero. Este estado presenta localización electrónica en el sitio del fasón. Este estudio también se hizo para el caso de un solo gusano de Conway en donde extendemos el fasón a lo largo del gusano.

[1] Y. Cao, *et al*, Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices, *Nature*, **556**, 43-50 (2018).

[2] U.A. Díaz-Reynoso, E. Huipe-Domratcheva, O. Navarro, Flat-bands in translated and twisted bilayer Penrose quasicrystals, *J.Phys.: Condens. Matter*, **36**, 395502, (2024).

X.19 Caminos de Corriente Atómicamente Finos en Grafeno Kekulé-O

Galván y García, Santiago¹, Stegmann, Thomas¹, Betancur Ocampo, Yonatan², Sánchez Ochoa, Francisco²

¹*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México*

²*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México*

Correo electrónico: santiagogyg@icf.unam.mx

Demostramos que el flujo de corriente en grafeno puede ser manipulado en caminos atómicamente delgados mediante ingeniería de distorsiones Kekulé-O. Una frontera de grano separa al sistema en dos regiones topológicas distintas de Kekulé-O e induce un estado de pared de dominio balístico. El estado es independiente de la orientación de la frontera de grano respecto a las subredes de grafeno y permite guiar la corriente en caminos diseñados. [1] Este estado presenta una brecha de banda prohibida, por lo que puede ser manipulado con un potencial de compuerta. Nuestros resultados son explicados por una generalización del modelo de Jackiw-Rebbi [2], donde los electrones en una región del sistema se comportan como Fermiones con masa efectiva compleja. Demostramos que se puede realizar este sistema mediante cálculos DFT, decorando el sistema con átomos de Ti.

[1] Semenoff, G.W.; Semenoff, V.; Zhou, F. Domain Walls in Gapped Graphene. Phys. Rev. Lett. 2008, 101, 087204 [2] Jackiw, R.; Rebbi, C. Solitons with fermion number 1/2. Phys. Rev. D 1976, 13, 3398–3409

Agradecimientos

Agradecemos el apoyo financiado por UNAM-PAPIIT bajo el Proyecto-ID IN103922, Proyecto-ID IA106223 y al CONAHCYT bajo el Proyecto-ID A1-S-13469.

X.20 Adsorption of diatomic atmospheric compounds on defective MoS₂ monolayers

Josué Gutiérrez Rodríguez¹, Eduardo Rangel¹, Dora Iliana Medina² and Alan Miralrio^{*1}

¹ Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Av. Eugenio Garza Sada 2501, Monterrey 64849, N.L., México

² Department of Industrial Engineering and Operations, Instituto Tecnológico Autónomo de México, México

Abstract

The role of small diatomic molecules, such as NO and CO, as secondary greenhouse gases has prompted extensive research efforts to mitigate their environmental impact. The adsorption of these molecules on modified surfaces offers a promising avenue for pollutant reduction strategies. In this context, we explore the interaction between diatomic molecules and MLs of coinage metals integrated into MoS₂ vacancy defects, aiming to understand the electronic and magnetic responses induced by adsorption.

Keywords

Adsorption, diatomic molecules, MoS₂ monolayers, substitutional defects, coinage metals

X.21 Transporte auto-similar y factores de escala en estructuras fractales tipo Cantor basadas en la bicapa de grafeno

G. A. Navarro-López¹, R. Rodríguez-González¹, R. D. Valdez-Cepeda^{2,3} y I. Rodríguez-Vargas¹

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia,
Universidad Autónoma de Zacatecas

²Centro Regional Universitario Norte Centro, Universidad Autónoma Chapingo.

³Unidad Académica de Matemáticas, Universidad Autónoma de Zacatecas.

Correo electrónico: ganavarrolopez@uaz.edu.mx

Con el surgimiento del “grafeno” en el 2004 por Geim y Novoselov [1] y la posterior aparición de otros materiales bidimensionales (2D), una de las ramas más beneficiadas ha sido la ingeniería de los nanomateriales, entre los cuales destacan las hetero-estructuras fractales, construidas a partir de estructuras complejas y materiales 2D. En la actualidad, existen numerosos trabajos que estudian ampliamente sus propiedades físicas, entre las que destaca el transporte cuántico de portadores de carga, donde se ha reportado que varias de las propiedades intrínsecas, en especial la conductancia, dependen directamente de la geometría empleada [2]. Con la finalidad de verificar la presencia de auto-similitud y en consecuencia obtener factores de escala en los espectros de transmitancia (T) y conductancia (G), en este trabajo se estudian las propiedades de transmisión y transporte en estructuras complejas fractales tipo Cantor basadas en la bicapa de grafeno (BLG). Dado que nuestro tema de interés es estudiar los espectros T y G en sistemas complejos de baja dimensión, se sabe que los portadores de carga son descritos por su Hamiltoniano a cuatro bandas [3], mismo que es reescrito en la forma de Sturm-Liouville para proponer una solución no trivial a la ecuación de Dirac, la cual, al resolver por el método de la matriz híbrida [3, 4, 5], nos permite obtener T, que al aplicar el formalismo de Landauer-Büttiker finalmente nos permite calcular G.

Se han calculado los espectros T y G para diferentes generaciones (N) de la estructura Cantor, encontrando rasgos de auto-similitud en las propiedades físicas estudiadas, en consecuencia, se muestran las reglas de escala obtenidas. Hasta el momento, se sabe que no existen trabajos que reportan estos resultados para la BLG.

Agradecimientos: G.A.N.L. agradece al **SECIHTI** por el apoyo financiero para los estudios de doctorado.

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306:666–669**, 10. (2004)
- [2] E. van Veen, A. Tomadin, M. Polini, M. I. Katsnelson, and S. Yuan, Optical conductivity of a quantum electron gas in a sierpinski carpet, *Physical Review B*, **96**, 235438 (2017)
- [3] J. A. Briones-Torres, R. Pérez-Álvarez, S. Molina-Valdovinos, and I. Rodríguez-Vargas, Enhancement of the thermoelectric properties in bilayer graphene structures induced by fano resonances, *Scientific Reports*, **11**, (2021)
- [4] R. Pernas-Salomón and R. Pérez-Alvarez, Sturm-Liouville Matrix Equation for the Study of Electromagnetic-Waves Propagation in Layered Anisotropic Media, *Tech. Rep.* (2014)
- [5] J. A. Briones-Torres, R. Pernas-Salomón, R. Pérez-Álvarez, and I. Rodríguez-Vargas, Hybrid matrix method for stable numerical analysis of the propagation of dirac electrons in gapless bilayer graphene superlattices, *Superlattices and Microstructures*, **93**, 186 (2016)

X.22 Demostración experimental de un mecanismo para generar polaritones pesados robustos en cavidades fuertemente acopladas

Rodrigo Sanchez Martinez, Yesenia Angelica Garcia Jomaso, David Ley Dominguez, Cesar L. Ordonez Romero, Hugo A. Lara Garcia, Arturo Camacho Guardian, Giuseppe Pirruccio

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. Apartado Postal 20-364. Ciudad de México C.P. 01000, México.

Correo electrónico: rodrigo.smtz@icloud.com

En este trabajo presentamos el diseño teórico y la demostración experimental de un mecanismo que permite proteger estados híbridos luz-materia exóticos, conocidos como polaritones de intercavidad, en sistemas de cavidades ópticas unidimensionales fuertemente acopladas. Estos estados tienen la peculiaridad de tener sus componentes de luz y materia espacialmente separados [1]. Dado que el sistema presenta una configuración de tres niveles análoga al esquema Λ utilizado en física atómica, es posible establecer una condición energética que garantiza la robustez del polaritón de intercavidad, de forma análoga a la apertura de una ventana de transparencia electromagnética. Esta condición se manifiesta como una dispersión aplanada del modo polaritónico intermedio, asociada a una masa efectiva elevada y ajustable, lo que permite generar polaritones pesados sin comprometer la coherencia de la mezcla luz-materia ni la separación espacial entre sus componentes excitónicos y fotónicos. El análisis de la reflectancia resuelta en ángulo y espectro, medida en el Laboratorio de Nanofotónica Avanzada del Instituto de Física, confirma las predicciones teóricas y pone en evidencia la viabilidad experimental del mecanismo propuesto. Estos resultados abren nuevas posibilidades para aprovechar los polaritones de intercavidad como una herramienta para intensificar efectos no lineales en sistemas polaritónicos, así como para su implementación en aplicaciones avanzadas, como plataformas de simulación cuántica.

Agradecimientos

R. Sanchez Martinez agradece a la Secretaria de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación por la beca otorgada (CVU 1101518) para el desarrollo del doctorado en Ciencias Físicas dentro del Instituto de Física de la UNAM.

[1] Yesenia A. García Jomaso et al., Intercavity polariton slows down dynamics in strongly coupled cavities, *Nature Communications* **15**, 2915. (2024)

X.23 Síntesis y caracterización de la perovskita simple SrFeO₃ dopada con Ga

Omar Vicente Toledo Ruíz^{1,2}, Tania E. Soto¹, Michel Rivero¹

¹*Instituto de Investigación en Materiales, Unidad Morelia, Universidad Nacional Autónoma de México. Antigua Carretera a Pátzcuaro 8701, ex Hacienda de San José de la Huerta, 58190 Morelia, Michoacán, México.*

²*Centro de Investigaciones Químicas, Instituto de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 2001, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62210, Cuernavaca, Morelos, México.*

Correo electrónico: omvitoru@gmail.com tania@materiales.unam.mx

Las perovskitas son óxidos magnéticos que se caracterizan por sus diversas propiedades físicas como fotoluminiscencia, baja densidad de defectos, larga longitud de difusión electrón-hueco, amplios espectros de absorción, entre otros [1,2]. Estas propiedades vuelven a este material muy atractivo para la investigación en ciencia de materiales [3,4]. En este trabajo de investigación, se reporta la síntesis de la perovskita simple SrFeO₃ por el método de estado sólido y su dopaje al introducir átomos de Ga en su estructura cristalina con la finalidad de observar los cambios en las propiedades ópticas, químicas, morfológicas, estructurales y magnéticas que presentaba el compuesto, utilizando para ello, diferentes técnicas de caracterización como difracción de rayos x, microscopia electrónica de barrido, microscopia electrónica de transmisión, refinamientos Rietveld, entre otros.

Agradezco al CONACYT por el apoyo financiero durante mis estudios de maestría con la beca número 1320367

- [1] Shi, D., Adinolfi, V., Comin, R. et al. Low trap-state density and long carrier diffusion in organolead trihalide perovskite single crystals. *Science* 347: 519-522 (2015)
- [2] Yettapu, G.R., Talukdar, D., Sarkar, S. et al. Terahertz conductivity within colloidal CsPbBr₃ perovskite nanocrystals: remarkably high carrier mobilities and large diffusion lengths. *Nano Letters* 16: 4838-4848 (2016)
- [3] Kang, J. and Wang, L.W. High defect tolerance in lead halide perovskite CsPbBr₃. *The Journal of Physical Chemistry Letters* 8: 489-493 (2017)
- [4] Meng, H. *Perovskite Light Emitting Diodes: Materials and Devices*. Jhon Wiley & Sons (2024)